西北工业大学专著出版基金资助项目

非线性动力学系统的几何积分理论及应用

张素英　邓子辰　著

西北工業大學出版社

【内容简介】 本书首先论述了广义 Hamilton 系统及广义 Hamilton 约束系统的几何积分方法，进而在较详细地介绍了李级数解法和李群李代数基本知识的基础上，又系统而深入地论述了更为广泛的一般形式的非线性动力学微分方程的李群积分方法。

本书可供高等院校应用数学专业、物理专业及力学专业的高年级学生、研究生、教师以及有关的科技工作者参考。

图书在版编目(CIP)数据

非线性动力学系统的几何积分理论及应用/张素英，邓子辰著.
—西安：西北工业大学出版社，2004.12
ISBN 7-5612-1874-5

Ⅰ.非… Ⅱ.①张… ②邓… Ⅲ.非线性方程—动力系统(数学)—几何积分论 Ⅳ.O177.8

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2004)第 138123 号

出版发行：西北工业大学出版社
通信地址：西安市友谊西路 127 号 邮编：710072
电　　话：029－88493844 88491757
网　　址：www.nwpup.com
印 刷 者：陕西向阳印务有限公司
开　　本：850 mm×1 168 mm 1/32
印　　张：9.125
字　　数：222 千字
版　　次：2005 年 1 月第 1 版 2005 年 1 月第 1 次印刷
定　　价：18.00 元

序

动力学系统存在于众多科学和工程领域，因此研究动力学系统，特别是研究非线性动力学系统的数学力学理论和计算方法已经受到数学、物理、力学乃至工程科学家的重视，成为当今世界上基础和应用基础研究的热门领域。

动力学系统保结构算法(几何积分方法)始于我国著名数学家冯康院士于上世纪 80 年代初创立的 Hamilton 系统辛几何算法，它已经发展成为包括经典 Hamilton 系统辛几何算法、无穷维 Hamilton 系统多辛几何算法和微分方程李群算法在内的一个重要的计算体系；著名力学家钟万勰院士也于上世纪 80 年代后期在计算结构力学和控制论的基础上，建立了一套 Hamilton 系统的辛几何算法及其时程精细积分方法，并已有相应的专著出版。

本书第一作者在攻读博士学位期间，与其导师(第二作者)一起对非线性动力学系统，包括非线性耗散与约束动力学方程的计算方法，进行了深入系统的研究，并发展和提出了若干有创造性的新型保结构算法，其中包括：拓展微分方程李群方法得到求解任意动力学方程的李级数方法；Poisson 流形上广义 Hamilton 系统的保结构算法；耗散广义 Hamilton 系统和广义 Hamilton 控制系统的李群积分方法；基于 Laplace 变换的数值反演方法；广义 Hamilton 约束系统的李群积分法；基于 Magnus 展开的求解非线性动力学方程的李群方法；基于 Fer 展开求解非线性动力学方程的超收敛积分公式，以及利用 Minkowski 空间的精细积分方法等。

本书是作者在其博士论文基础之上，经过系统全面的整理、扩

充和完善而形成的，它是在动力学系统计算方法及其数学理论方面的又一本具有重要理论意义和工程应用价值的学术专著；它的出版发行将会在推进动力系统研究，特别是非线性动力学方程计算方法研究方面发挥重要作用。

在此，向作者表示祝贺，并希望作者在非线性动力系统研究领域再创辉煌。

崔俊芝

2005 年 1 月 12 日

前　言

动力学系统是一个广泛的研究领域，它包含大量的物理系统、化学系统、生物系统及各种工程系统等。这些系统的表现形式虽然千差万别，但其运动规律却具有相似的数学模型。一般地，它们可以用常微分方程和偏微分方程的数学模型来描述。这些问题所属的物理学、力学和工程技术本身的特殊规律，常常会在问题的严格数学处理之前，提示求解问题的定性的思想和方法，促使具体问题的解决。尤其是，如果微分方程的几何性质代表了一个关键的物理解释，那么必须强调要保持微分方程的真解的几何性质，如渐进性质、不变量、辛性、李对称性等等。具有足够小的误差，且能保持系统的重要定性性质的算法就是所谓的几何积分方法。

当今时代，科学计算已是独立于理论研究、实验研究的一种基本的科学活动，一般不再仅仅把它看做理论研究、实验研究的辅助手段。因此，作为独立的一种研究手段，从计算力学的角度讲，动力学方程的数值计算，必然需要利用其定性知识，反映它的几何性质，有时保持动力学方程的不变量尤其重要。冯康院士和他领导的课题组深入、系统地研究了 Hamilton 系统的辛几何算法，开辟了一个理应受到重视但却长期被忽视的研究领域。Hamilton 体系的研究对象是保守系统，而耗散系统广泛存在于自然界和日常生活中，近年来随着研究的深入，如何处理耗散系统问题已成为学术界关注的焦点。

本书基于李群李代数的方法讨论了广义 Hamilton 系统及带耗散的广义 Hamilton 系统的几何积分方法。耗散动力学系统是

一个广泛的研究领域，有时，很难把所研究的系统表示为一个耗散 Hamilton 受控系统，即存在所谓广义 Hamilton 实现问题。因此我们进一步研究了非线性动力学一般方程的几何积分方法。根据算子半群理论，动力学微分方程系统都可以写成线性映射作用的模型形式。另一方面，任意非线性动力学方程均可以转化为 Minkowski 空间上的李型方程，而且自然呈现出了原非线性系统在 Minkowski 空间的内在对称群性质。在算子理论范围，或把动力学系统的构形空间拓展到 Minkowski 空间，使得原动力学方程可以表示为一个李型方程，基于线性微分方程的几何积分方法，我们从两个不同的角度分别讨论了一般非线性动力学系统的几何积分方法。

本书的内容主要取材于作者就读西北工业大学时的博士学位论文。为了使书中内容严密、有据，我们还介绍了散见于国内外专著和期刊的某些基本结果及有关的基础知识。

全书共分九章。第一章绪论主要介绍了微分方程的几何积分方法的思想。第二章讨论了非线性动力学系统的李级数解法、基于 Laplace 逆变换及 Laplace 变换数值反演等一系列新的数值方法。第三、四章分别讨论了广义 Hamilton 系统及耗散广义 Hamilton 约束系统的几何积分方法。第五、六章分别介绍了流形及李群上的微分方程及其解法。第七、八章讨论了一般非线性动力学系统的几何积分方法。第九章讨论了非线性动力学方程的精细积分方法。

在本书相关内容的研究和全书写作过程中，得到大连理工大学钟万勰院士、中国科学院数学与系统科学研究院崔俊芝院士和洪佳林教授的鼓励和支持。晨兴数学中心举办的“动力系统保结构算法”研讨班的学习与交流对书稿的完成有很大的帮助。同时，研究和写作工作长期得到国家自然科学基金的资助（编号为 19872057，10372084，10472059），还得到教育部新世纪优秀人才基

金，霍英东青年教师基金(编号为 71005)，高校博士点专项基金(编号为 20010699016)，航空科学基金(编号为 00B53006)，陕西省自然科学基金(编号为 2002A17)及西北工业大学博士论文创新基金的资助；本书的出版得到西北工业大学出版基金的资助。作者在此一并表示衷心感谢。

由于作者学识的限制，本书难免存在不妥乃至错误的地方，敬请读者指正。

作 者

2004 年 10 月

目　录

第一章　绪论 ………………………………………………… 1

1.1　引言 ………………………………………………… 1

1.2　常微分方程的几何积分方法及其研究现状 ………… 3

1.3　研究背景与意义 ………………………………………… 10

1.4　主要内容 ………………………………………………… 13

参考文献 ………………………………………………… 15

第二章　非线性动力学方程的新解法 ……………………… 19

2.1　引言 ………………………………………………… 19

2.2　李级数解法 ………………………………………………… 20

2.2.1　基本方程 ………………………………………………… 20

2.2.2　常微分方程组初值问题的李级数解 ……………… 22

2.2.3　李级数数值方法 ………………………………………… 23

2.2.4　N 阶常微分方程的解法 ……………………………… 25

2.2.5　算例 ………………………………………………… 26

2.3　基于 Laplace 逆变换数值求解非线性动力学方程的新方法 ………………………………………………… 28

2.3.1　数学理论 ………………………………………………… 28

2.3.2　数值方法 ………………………………………………… 30

2.3.3　特例——线性常微分方程的求解 ……………………… 31

2.3.4 算例 …… 32
2.4 基于 Laplace 数值反演的新方法 …… 34
2.4.1 关于函数的 Laplace 变换的数值反演方法 …… 34
2.4.2 基于 Laplace 变换数值反演的非线性动力学方程的新算法 …… 35
2.4.3 算例 …… 38
2.5 本章小结 …… 40
参考文献 …… 41

第三章 广义 Hamilton 系统的保结构算法 …… 42

3.1 引言 …… 42
3.2 Poisson 流形上的广义 Hamilton 系统的数值解法 …… 44
3.2.1 Poisson 流形及广义 Hamilton 系统的基本理论 …… 44
3.2.2 广义 Hamilton 系统的保结构算法 …… 46
3.2.3 广义 Hamilton 控制系统中算法的应用 …… 48
3.2.4 算例 …… 49
3.3 Hamilton 系统的辛算法 …… 50
3.3.1 Hamilton 系统 …… 50
3.3.2 Hamilton 系统的辛算法 …… 52
3.3.3 共轭算法 …… 53
3.3.4 合成算法 …… 54
3.3.5 分裂合成方法 …… 55
3.4 BCH 公式 …… 56
3.4.1 指数映射的导数及其逆映射 …… 56
3.4.2 BCH 公式 …… 58

3.4.3 对称合成高阶算法 …… 61
3.5 耗散广义 Hamilton 自治系统的数值解法 …… 67
3.5.1 基本方程 …… 67
3.5.2 数值积分方法 …… 68
3.5.3 数值方法在广义 Hamilton 控制系统的应用 …… 70
3.5.4 算例 …… 71
3.6 广义 Hamilton(控制)系统的离散梯度积分法 …… 72
3.6.1 系统模型 …… 72
3.6.2 离散梯度及离散梯度积分法 …… 73
3.6.3 算例 …… 77
3.7 非自治耗散广义 Hamilton 系统的解法 …… 79
3.7.1 广义 Hamilton 系统的 Fer 展开方法 …… 79
3.7.2 广义 Hamilton 系统的 Magnus 级数方法 …… 82
3.7.3 算例 …… 86
3.8 本章小结 …… 88
参考文献 …… 88

第四章 耗散广义 Hamilton 约束系统的李群积分法 …… 92

4.1 引言 …… 92
4.2 Hamilton 约束系统的辛积分 …… 93
4.2.1 Hamilton 约束系统 …… 93
4.2.2 Hamilton 约束系统的辛积分 …… 96
4.2.3 Hamilton 约束系统的高阶辛积分 …… 101
4.2.4 化为无约束系统的辛积分方法 …… 102
4.3 广义 Hamilton 约束系统及其变形的无约束系统 …… 104

4.4 广义 Hamilton 约束系统的李群积分法 …………… 107
4.4.1 变形所得无约束广义 Hamilton 系统的李群积分法 …………… 107
4.4.2 约束不变量的稳定性 …………… 108
4.5 用投影技术求耗散广义 Hamilton 约束系统的李群积分 …………… 109
4.5.1 变约束方程为无约束方程 …………… 109
4.5.2 用投影技术求广义 Hamilton 约束系统的李群积分 …………… 110
4.5.3 直接构造广义 Hamilton 约束系统李群积分的投影方法 …………… 112
4.6 算例 …………… 112
4.7 本章小结 …………… 115
参考文献 …………… 115

第五章 流形上微分方程的解法及李群理论 …………… 117

5.1 引言 …………… 117
5.2 流形 …………… 119
5.3 李群 …………… 122
5.4 流形上的切空间与向量场 …………… 130
5.5 流形上的微分方程及其解法 …………… 144
5.5.1 流形上的微分方程 …………… 144
5.5.2 投影方法 …………… 145
5.5.3 流形上基于局部坐标的数值方法 …………… 146
5.6 李代数 …………… 147
5.7 本章小结 …………… 161
参考文献 …………… 161

第六章 李群上微分方程的积分方法 …… 162

6.1 引言 …… 162
6.2 流形上微分方程的 RKMK 方法 …… 165
6.3 Crouch-Grossman 方法 …… 166
6.4 基于第二类典则坐标的积分方法 …… 168
6.5 Magnus 展开方法 …… 169
6.5.1 Magnus 展开式 …… 169
6.5.2 Magnus 级数展开与平面双枝树的关系 …… 173
6.6 Fer 展开式 …… 176
6.7 本章小结 …… 180
参考文献 …… 180

第七章 一般非线性动力学方程的几何积分方法 …… 182

7.1 引言 …… 182
7.2 一般非线性动力学系统的增广动力学系统形式及其锥结构 …… 186
7.2.1 动力学系统的增广动力学系统形式 …… 186
7.2.2 洛仑兹群及其李代数的性质 …… 188
7.3 基于 Cayley 变换构造保群格式 …… 189
7.4 基于 Pade 逼近构造保群格式 …… 191
7.5 部分旋转矢量场 …… 195
7.6 $\boldsymbol{S}^{n-1}$ 上的旋转矢量场 …… 198
7.7 基于 Magnus 展开式的近似方法 …… 199
7.7.1 线性常微分方程的求解方法 …… 199
7.7.2 在 Minkowski 空间构造非线性微分方程的近似解 …… 203

7.7.3 一个简单易行的四阶积分法 …………………… 212
7.7.4 基于解算子的 Magnus 展开式构造非线性微分方程的近似解法 …………………………………… 218
7.7.5 基于 Magnus 展开式的数值方法的收敛性分析 ………………………………………………… 229
7.8 基于 Fer 展开式构造非线性动力学方程的近似解法 ………………………………………………… 231
7.8.1 在 Minkowski 空间进行 Fer 展开 …………… 231
7.8.2 基于 Magnus 展开式的 Fer 型近似解 ……… 233
7.8.3 关于时间对称的 Fer 型积分格式 …………… 234
7.8.4 动力学方程的解算子的 Fer 展开式 ………… 235
7.8.5 基于 Magnus 展开式的另一类 Fer 型近似格式 ………………………………………………… 236
7.8.6 基于 Fer 展开的数值方法的收敛性分析 …… 237
7.8.7 算例 ……………………………………………… 238
7.9 本章小结 ………………………………………………… 240
参考文献 ……………………………………………………… 241

第八章 基于 RKMK 方法构造一般非线性动力学方程的数值解法 ……………………………………………… 245

8.1 引言 ……………………………………………………… 245
8.2 李群上微分方程的 RKMK 方法 …………………… 246
8.3 一般非线性动力学系统的李群算法 ……………… 248
8.4 算例 ……………………………………………………… 250
8.5 几何积分方法的向后误差分析性质 ……………… 253
8.5.1 向后误差分析的基本概念 ……………………… 253
8.5.2 几何积分方法的向后误差分析性质 ………… 255

8.5.3 向后误差分析的截断误差 …………………… 255
8.6 本章小结 …………………………………… 257
参考文献……………………………………………… 257

第九章 非线性动力学方程的精细积分法…………………… 260

9.1 引言 ………………………………………… 260
9.2 非线性动力学方程在 Minkowski 空间的精细积分方法 ………………………………………… 261
9.3 增维的精细积分法 ………………………… 263
9.4 对称合成方法 ……………………………… 264
9.5 精细 Runge-Kutta 方法 …………………… 265
9.6 算例 ………………………………………… 267
9.7 本章小结 …………………………………… 271

参考文献……………………………………………… 274

第一章　绪　论

1.1　引　言

用数学方法研究力学与工程技术中的具体问题，是力学研究工作者面临的重要任务之一。首先，依据由观察和实验所确立的基本规律，摈弃次要属性，借助数学工具建立有关物理量之间相互制约的运动关系，这种数学关系或具体算法称为数学模型。建立数学模型的目的是运用数学方法对问题进行求解。因此，更为重要的是研究数学模型的求解方法，给出未知物理量的解析表示或数值结果；研究它的解的一般性质，解释物理过程的关联与演化。动力学系统是一个广泛的研究领域，它包含大量的物理系统、化学系统、生物系统，以及各种工程系统等。这些系统的表现形式虽然千差万别，但其运动规律却具有相似的数学模型。一般地，动力学系统可以用常微分方程和偏微分方程的数学模型来描述。例如，自动控制系统的运行、电力系统的运行、飞行器的轨道控制、化学反应过程、生态平衡问题等，其数学模型都是常微分方程组初值问题和微分代数方程。许多偏微分方程通过空间离散化也可化为常微分方程的初值问题。本书主要是针对常微分方程初值问题和微分代数方程描述的动力学系统来讨论其数值解法。

传统上，人们从两个极端不同的出发点来理解和掌握常微分方程问题。纯数学家对问题认识深刻，推导严密，并采用大范围整体化的定性知识；而数值分析家通过构造富有技巧的算法，以获得只有很小的误差的离散解，他们一般不考虑整体的定性性质。孰优

孰劣?这要视具体问题具体分析。如果问到:“局部误差多大?”这个问题大可以由传统的数值分析方法来解决。事实上,真实的物理过程都不是极端的。在数学物理问题的研究中,问题所属的物理学、力学和工程技术本身的特殊规律,常常会在问题进行严格数学处理之前,提示求解问题定性的思想和方法,并促使具体问题的解决。本书强调应将微分方程的几何性质等定性信息与数值计算有机地结合起来,进而处理实际问题。

大部分在物理学中显示巨大威力的新的数学思想均来自于几何与分析的交叉。我们可以简单地回顾微分方程与几何学不可分割的历史渊源。18 世纪以前的物理学家和自然哲学家,如 Copernics,Galileo,Kepler,Newton 等都对几何学非常熟悉,他们常用几何概念来表达其物理思想。在 19 世纪,Descartes 对 Euclid 几何引入坐标后,将几何学的研究看成是代数与分析的应用,这引起了几何学的革命,促进了在几何学中各种分析工具的应用。与此同时,在物理学中利用坐标概念将自然定律表示成微分方程,促进了物理学的发展。在此阶段,多数物理学家主要注意对物理体系局域运动性质的探讨,对运动实体的内部对称性及大范围整体性质往往注意不足。拓扑学与微分几何在物理学的重要性常被忽视,甚至任何物理现象都在空间发生,任何物理理论都依赖于空间和时间的基本几何特性这样明显的事实也往往被忽视。19 世纪中叶,Maxwell 从实验观察总结出电磁现象的运动方程,注意到 Maxwell 方程组的共性不变性。Lorentz,Minkowski 之后,直到 20 世纪初,Einstein 提出了狭义相对论,人们才进一步深入认识到了时空的基本几何特性的重要性。这时主要应用的数学工具是微分方程及群论分析等。长期以来,微分方程在自然现象的数学研究中起到了决定性的作用。人们充分认识到,通过研究微分方程的几何性质,可以获知它的真解的关键性的定性特征。其中最重要的例子是 Alexander Rowan Hamilton 提出的力学定理,它使人们可以用

更复杂的几何工具来理解和研究刚体体系及太阳系等复杂系统的力学性质，可以用相应的 Hamilton 函数的对称性的概念来理解和研究诸如能量、线性动量与角动量等 Hamilton 系统的守恒性质。用以研究微分方程另一个同样重要的几何方法是应用由 Sophus Lie 开创的基于对称性的方法。20 世纪 80 年代以来，随着非线性微分方程研究的需要，通过微分方程的对称性来研究非线性微分方程的性质，特别是用于简化或完全求解微分方程，已成为一个十分重要的课题。

当今时代，科学计算已成为独立于理论研究、实验研究的一种基本的科学活动，一般不再仅仅把它看做理论研究、实验研究的辅助手段。作为一种独立的研究手段，在计算力学和计算数学领域，求动力学方程的数值解，必然需要利用其定性知识，反映它的几何性质。尤其当微分方程的几何性质代表了一个关键的物理解释，那么必须强调要保持微分方程的真解的几何性质，如渐进性质、不变量、辛性、李对称性等等。具有足够小的误差，且能保持系统的重要定性性质的算法就是所谓的几何积分法。几何积分无论是在提高计算精度还是在保持系统的不变量性质等方面都比传统的积分方法有优势。近几年，线性常微分方程的几何积分方法，尤其是基于经典的 Magnus 和 Fer 展开方法的几何积分方法已得到很大的发展。本书旨在研究任意非线性动力学微分方程的几何积分方法。几何积分法不仅对常微分方程数值解法自身的丰富和发展十分重要，而且对相关的非线性动力学问题的解决也具有重要意义。

1.2 常微分方程的几何积分方法及其研究现状

数值求解常微分方程的办法很多，如经典的龙格库塔(Runge-Kutta) 方法等线性多步方法，通常情况下这些方法都是有效的。然而，当我们预知微分系统的一些定性信息，并希望在数

值离散时能保持这些定性特征时，情况就大不一样了。有时保持动力学方程的不变量尤其重要。Iserles[1] 证明了所有线性多步方法都不能保持微分方程的非线性不变量。这些新的发现引发了对几何积分方法的热点研究，即在算法设计中要保持微分系统的不变量、强积分及对称性等性质。时变动力学系统的几何特征主要有如下三个方面：

(1) 首次积分，即形如 $I(\boldsymbol{x}(t)) = C$ 的守恒律。其中 $I:\boldsymbol{R}^n \to \boldsymbol{R}$ 是光滑函数。也就是说，微分方程的解位于光滑流形 $M = \{\boldsymbol{x} \in \boldsymbol{R}^n : \boldsymbol{I}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{I}[\boldsymbol{x}(t_0)]\}$，如 Hamilton 能量。

(2) 切丛 TM 上的微分不变量，如李对称性。

(3) 余切丛 T^*M 上的辛形式等不变量。余切丛 T^*M 是切丛 TM 上所有线性函数所组成的集合。

当然，不变量的分类不是相互排斥的。例如，Hamilton 问题既有余切丛上的辛不变量，又有守恒的 Hamilton 能量。一个好的数值方法应当注意这些对称性，如果可能，应当精确或近似保持这些对称性。本书将重点研究保持动力学系统的李代数结构不变的数值积分方法。

一个具有约束的力学系统的构形空间是一个微分流形，如果它是嵌入在欧几里得空间中的一个 n 维流形，则在每一点 $\boldsymbol{x}$ 都有一个 n 维切空间 TM_x。切空间 TM_x 中以 $\boldsymbol{x}$ 为起点的矢量称为 M 在 $\boldsymbol{x}$ 的切矢量。我们也可以把这些矢量直接定义为 M 中曲线的速度矢量，即

$$\dot{\boldsymbol{x}} = \lim_{t \to 0} \frac{\boldsymbol{\Psi}(t) - \boldsymbol{\Psi}(0)}{t} \tag{1.1}$$

式中，$\boldsymbol{\Psi}(0) = \boldsymbol{x}$，$\boldsymbol{\Psi}(t) \in M$。

流形上的一个矢量场定义一个相流，即一个单参数微分同胚群（李群）；流形上所有的矢量场构成一个李代数。具体说来，令 M 为一光滑流形，$\boldsymbol{f}$ 为其上的光滑矢量场，即在每一点 $\boldsymbol{x} \in M$ 均有一

个切矢量 $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) \in TM_x$。利用这个矢量场可以得出：

（1）单参数微分同胚群，即流：$\boldsymbol{\Psi}:M \to M$，而 $\boldsymbol{f}$ 为其速度矢量场，即

$$\left.\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\right|_{t=0} \boldsymbol{\Psi}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) \tag{1.2}$$

（2）一阶微分算子 $\boldsymbol{L}_f$。这里指的是沿场 $\boldsymbol{f}$ 方向对函数求导：对任意函数 $\varphi:M \to R$，$\boldsymbol{f}$ 方向的导数是一个新函数 $\boldsymbol{L}_f\varphi$，它在 $\boldsymbol{x}$ 的值是

$$(\boldsymbol{L}_f\varphi)(\boldsymbol{x}) = \left.\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\right|_{t=0} \varphi(\boldsymbol{\Psi x}) \tag{1.3}$$

M 上两个矢量场 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 的交换子或李括号是一个矢量场 $\boldsymbol{C} = [\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}]$ 使得

$$\boldsymbol{L}_C = \boldsymbol{L}_A\boldsymbol{L}_B - \boldsymbol{L}_B\boldsymbol{L}_A \tag{1.4}$$

这种微分算子的应用在经典力学领域已有很长的历史了。作为一种工具，微分算子及微分算子的交换子可以用于表示动力学系统的李代数结构。

在光滑流形上展开的微分方程的数值处理方法主要有离散梯度方法[2~3]、固定标架方法[4] 及李群(Lie Group) 积分方法[5~12]。其中，李群积分方法最为有效。其主要思想是：把在一个齐性空间(或李群) 上展开的微分方程变换为一个与之相应的李代数上展开的等价微分方程。李代数是矢量空间(线性空间)，因此，经典的龙格库塔法等数值方法就可以用于近似求解变换后的微分方程。不失一般性，我们可以设微分方程为

$$\left.\begin{aligned} \dot{\boldsymbol{x}} &= \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x},t)\boldsymbol{x}, \quad t \geqslant 0 \\ \boldsymbol{x}(t_0) &= \boldsymbol{x}_0 \in G \end{aligned}\right\} \tag{1.5}$$

式中，$\boldsymbol{A}:G\times R^+ \to g$，$g$ 是李群 G 的李代数，方程式(1.5) 的解应保持在李群 G 上。为达到此目的，把微分方程式(1.5) 先推向李代数 g，在 g 上求解等价的微分方程，所得数值解由指数映射拉回到李

群 G,便可得到原微分方程的数值解。这个过程可以在每一个时间步长重复进行,如图 1.1 所示。

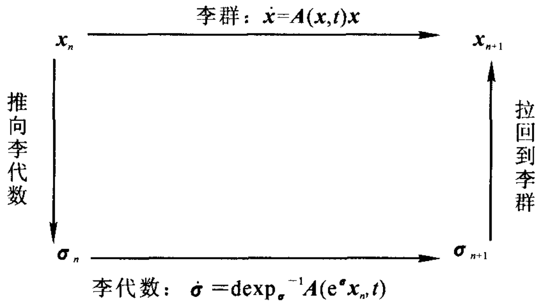


图 1.1 求解过程

在这里,$\boldsymbol{A}:G\times R^+\to g$ 和 $\boldsymbol{\sigma}(t)$ 在李代数 g 上展开。由李代数拉回到李群可以通过指数映射 $\boldsymbol{x}_{n+1}=\exp(\boldsymbol{\sigma}_{n+1})\boldsymbol{x}_n$ 来完成;而由李群推向李代数则需要求出指数映射的微分的逆,即

$$\dot{\boldsymbol{\sigma}}=\mathrm{dexp}_{\boldsymbol{\sigma}}^{-1}\boldsymbol{A}(\mathrm{e}^{\boldsymbol{\sigma}}\boldsymbol{x}_n,t)=\sum_{l=0}^{\infty}\frac{B_l}{l!}\mathrm{ad}_{\boldsymbol{\sigma}}^l\boldsymbol{A}(\mathrm{e}^{\boldsymbol{\sigma}}\boldsymbol{x}_n,t),\quad t\geqslant t_0,\ \boldsymbol{\sigma}(t_0)=\boldsymbol{0} \tag{1.6}$$

式中,B_l, $l=0,1,2,\cdots$,是伯努利(Bernoulli)数,其前几个系数是

$$\frac{B_l}{l!}=\begin{cases}0 & l\text{ 是奇数},l\neq 1\\ 1,-\dfrac{1}{2},\dfrac{1}{12},-\dfrac{1}{720},\dfrac{1}{30\,240}, & l=0,1,2,4,6,8,10\\ -\dfrac{1}{1\,209\,600},\dfrac{1}{470\,160} & \end{cases}$$

而李代数中的共轭算子 ad_u 是迭代交换子,即

$$\mathrm{ad}_{\boldsymbol{u}}^l\boldsymbol{v}=\overbrace{[\boldsymbol{u},[\boldsymbol{u},\cdots,[\boldsymbol{u},\boldsymbol{v}]\cdots]]}^{l\text{ 次}},\ l\geqslant 0 \tag{1.7}$$

当然,在李代数上构造求解微分方程式(1.6)的数值方法要求其数值解仍属于李代数 g。因为李代数是线性空间,只要采用其线性

运算和交换子运算就能保证$\boldsymbol{\sigma}_{n+1} \in g$。Runge-Kutta/Munthe-Kaas格式[13~14] 就是应用经典的 Runge-Kutta 方法求解适当截断后的微分方程式(1.6),然后拉回到李群 G 得到式(1.5) 的解。例如,求解式(1.5) 的经典的三阶 Runge-Kutta 方法如下:

$$\left.\begin{aligned}
\boldsymbol{k}_1 &= \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}_n,\ t_n)\boldsymbol{x}_n \\
\boldsymbol{k}_2 &= \boldsymbol{A}\left(\boldsymbol{x}_n + \frac{1}{2}h\boldsymbol{k}_1,\ t_n + \frac{1}{2}h\right)\left(\boldsymbol{x}_n + \frac{1}{2}h\boldsymbol{k}_1\right) \\
\boldsymbol{k}_3 &= \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}_n - h\boldsymbol{k}_1 + 2h\boldsymbol{k}_2,\ t_{n+1})(\boldsymbol{x}_n - h\boldsymbol{k}_1 + 2h\boldsymbol{k}_2) \\
\boldsymbol{u} &= h\left(\frac{1}{6}\boldsymbol{k}_1 + \frac{2}{3}\boldsymbol{k}_2 + \frac{1}{6}\boldsymbol{k}_3\right) \\
\boldsymbol{x}_{n+1} &= \boldsymbol{x}_n + \boldsymbol{u}
\end{aligned}\right\} \tag{1.8}$$

然而,该方法不能保证 $\boldsymbol{x}_n$, $n = 0,1,2,\cdots$ 属于李群 G。只要把构形空间由 G 变到 g,在李代数 g 上求解其等价方程再拉回到李群 G,如式

$$\left.\begin{aligned}
\boldsymbol{k}_1 &= \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}_n,\ t_n) \\
\boldsymbol{k}_2 &= \boldsymbol{A}\left(\exp\left(\frac{1}{2}h\boldsymbol{k}_1\right)\boldsymbol{x}_n,\ t_n + \frac{1}{2}h\right) \\
\boldsymbol{k}_3 &= \boldsymbol{A}(\exp(-h\boldsymbol{k}_1 + 2h\boldsymbol{k}_2)\boldsymbol{x}_n,\ t_{n+1}) \\
\boldsymbol{u} &= h\left(\frac{1}{6}\boldsymbol{k}_1 + \frac{2}{3}\boldsymbol{k}_2 + \frac{1}{6}\boldsymbol{k}_3\right) \\
\boldsymbol{x}_{n+1} &= \exp\left(\boldsymbol{u} + \frac{1}{6}h[\boldsymbol{u},\boldsymbol{k}_1]\right)\boldsymbol{x}_n
\end{aligned}\right\} \tag{1.9}$$

即可保持其李群结构。

另一类李群方法则可由 Magnus 展开式[15] 及 Fer 展开式[16] 获得。对于线性微分方程

$$\dot{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{A}(t)\boldsymbol{x} \tag{1.10}$$

它对应于式(1.6) 的 $\boldsymbol{\sigma}(t)$ 为

$$\boldsymbol{\sigma}(t) = \int_0^t \boldsymbol{A}(\xi)\mathrm{d}\xi - \frac{1}{2}\int_0^t\int_0^{\xi_1}[\boldsymbol{A}(\xi_2),\ \boldsymbol{A}(\xi_1)]\mathrm{d}\xi_2\mathrm{d}\xi_1 +$$

$$\frac{1}{4}\int_0^t\int_0^{\xi_1}\int_0^{\xi_2}[[\boldsymbol{A}(\xi_3),\boldsymbol{A}(\xi_2)],\boldsymbol{A}(\xi_1)]\mathrm{d}\xi_3\mathrm{d}\xi_2\mathrm{d}\xi_1+$$
$$\frac{1}{12}\int_0^t\int_0^{\xi_1}\int_0^{\xi_2}[\boldsymbol{A}(\xi_3),[\boldsymbol{A}(\xi_2),\boldsymbol{A}(\xi_1)]]\mathrm{d}\xi_3\mathrm{d}\xi_2\mathrm{d}\xi_1+\cdots \tag{1.11}$$

将其称为它的 Magnus 展开式。另一个相似的展开式是 Fer 展开式，它给出了线性方程式(1.10) 如下形式的解：

$$\boldsymbol{x}(t)=\exp\left[\int_0^t\boldsymbol{A}(\xi)\mathrm{d}\xi\right]\boldsymbol{z}(t),\quad t\geqslant 0 \tag{1.12}$$

其中，$\boldsymbol{z}$ 由线性微分方程

$$\left.\begin{aligned}&\dot{\boldsymbol{z}}=\left[\sum_{l=1}^{\infty}\frac{(-1)^l}{(l+1)!}\mathrm{ad}^l_{\int_0^t\boldsymbol{A}(\xi)\mathrm{d}\xi}\boldsymbol{A}(t)\right]\boldsymbol{z},\quad t\geqslant 0\\&\boldsymbol{z}(t_0)=\boldsymbol{x}(t_0)\end{aligned}\right\} \tag{1.13}$$

确定。如此迭代，最终产生的解是无穷个指数矩阵乘积的形式。

Magnus 展开式和 Fer 展开式的优点在于：即使适当截断展开式，它们依然保持精确解的定性性质。例如，如果式(1.10) 是量子力学中的发展方程，那么由 Magnus 展开式和 Fer 展开式适当截断所得的近似分析解具有正交性。一般地，如果式(1.10) 中的 $\boldsymbol{A}(t)$ 属于李代数 g，那么由截断 Magnus 展开式和 Fer 展开式所得的近似分析解则落在相应的李群 G 上。Iserles[12] 等首次把 Magnus 展开式的这些优点引入到数值算法，将其用于求解不同的问题，都得到了比传统数值方法更好的结果。它不仅保持了定性性质、具有很好的稳定性，而且使计算更加精确、有效。然而，上述方法都涉及了大量的重复计算交换子，这会大大限制这些方法的应用，而应用李代数的线性相关性，交换子的计算可得到大幅度减少[17]。

另外，需要强调的是常常与前述李群积分法交错使用的合成技术[5]，它已成为李群积分中的一个常用技巧，它又称为分数步长方法。设

$$\boldsymbol{x}_{n+1}=\boldsymbol{\Phi}_h(\boldsymbol{x}_n) \tag{1.14}$$

是一个步长为 h 的单步方法，一个最简单的合成方法是

$$\boldsymbol{x}_{n+1}=\boldsymbol{\Phi}_{\alpha h}\circ\boldsymbol{\Phi}_{(1-\alpha)h}(\boldsymbol{x}_n) \tag{1.15}$$

可以选取 $\alpha\in R$ 来获得所需性质，譬如，提高精度。这种合成的办法可以推广到合成两个以上的子步骤，也可以在不同的子步骤里采用不同的数值方法。Yoshida技术[18]是一个著名的合成方法。假设 $\boldsymbol{\Phi}_h$ 是一个二阶近似方法而且关于时间对称，如隐式中点公式，令

$$\boldsymbol{\Psi}_h=\boldsymbol{\Phi}_{\alpha h}\circ\boldsymbol{\Phi}_{(1-2\alpha)h}\circ\boldsymbol{\Phi}_{\alpha h} \tag{1.16}$$

式中，$\alpha=\dfrac{1}{3}(2+2^{1/3}+2^{-1/3})$。不难证明：$\boldsymbol{x}_{n+1}=\boldsymbol{\Psi}_h(\boldsymbol{x}_n)$ 是一个四阶方法且关于时间对称。重复同样的过程（α 取不同的值）可提高精度到六阶、八阶等。

合成和分裂密不可分。给定一个初值问题 $\dot{\boldsymbol{x}}=\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})$，分裂 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}_1+\boldsymbol{A}_2$ 使得 $\dot{\boldsymbol{x}}=\boldsymbol{A}_i(\boldsymbol{x})$，$i=1,2$ 很容易近似求解（甚至可能精确求解），而后根据分裂所得问题的解来构造所谓困难问题的解。利用半群理论术语，设 $\boldsymbol{x}(t)=\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}_{t-t_0}}\boldsymbol{x}(t_0)$ 是原问题的解，记 $\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}^{(i)}_{t-t_0}}$，$i=1,2$ 是关于两个分裂问题的解半群，那么可用式

$$\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}_h}=\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}^{(1)}_{\alpha_1 h}}\circ\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}^{(2)}_{\beta_1 h}}\circ\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}^{(1)}_{\alpha_2 h}}\circ\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}^{(2)}_{\beta_2 h}}\circ\cdots\circ\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}^{(1)}_{\alpha_s h}}\circ\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}^{(2)}_{\beta_s h}} \tag{1.17}$$

近似求原问题的解半群。式中，$\sum\alpha_j=\sum\beta_j=1$。

总之，合成方法已经成为几何积分中强有力的技术方法，它有三个特点：① 能提高计算精度；② 能保持原动力学系统的不变量；③ 如果基本方法是时间对称的，则每用一次 Yoshida 合成技术能提高二阶精度。

对于一般动力学方程问题，非李群方法所得的解有可能产生伪阻尼或反阻尼现象，从而使数值解趋于不动点或很快发散，导致错误的结果，而李群积分法则可以避免这些不良现象的发生，且

数值生成的轨迹与真实轨迹更加逼近。目前上述几何积分方法多数还仅限于求解线性微分方程或某些特殊领域的非线性微分方程。

1.3 研究背景与意义

动力学系统的几何积分方法是近 20 年来在计算力学和计算数学与科学工程计算领域中非常活跃的研究方向。在这方面我国学者的研究特色及取得的研究成果已得到了国际学术界的公认。已故著名计算数学专家冯康院士及他所领导的课题组从 20 世纪 80 年代初期便开始了这方面的工作，他们的基本思想是在 Hamilton 体系下进行辛差分处理[19,20] 并构成辛格式。由于这方面的出色成果，使他于 1997 年获国家自然科学一等奖。20 世纪 80 年代后期大连理工大学钟万勰院士等在计算结构力学与最优控制模拟理论的基础上，利用交叉学科的优势，借助于最优控制领域的“状态空间法”，并通过引入对偶向量，建立了一套 Hamilton 动力体系的辛几何方法及时程精细积分理论[21]。这被学术界公认为近年来计算力学领域最重要的突破之一[22]。应该说，上述研究成果均在国内外学术界产生了重要的影响，并确立了我国学者在国际上的领先地位。

从目前的研究情况看，从 Lagrange 体系向 Hamilton 体系的过渡，其意义在于从传统的欧几里得的几何形态进入到了辛几何的形态之中，其突破了传统观念，从而使对偶的混合变量方法进入到应用力学的广大领域。但是，我们应该认识到，上述研究的一个重要前提是研究对象均限定为保守系统，而耗散系统广泛存在于自然界和日常生活中，近年来随着研究的深入，如何处理耗散系统问题已成为学术界关注的焦点。受保守系统的约束，这方面的研究

范围受到限制。由于问题的复杂性,一般情况下不能将现有的对保守系统的理论和方法简单地移植到耗散动力学系统,而需要进行深入的研究。从几何角度看,辛流形是研究 Hamilton 系统的恰当几何结构。当结构矩阵出现奇异时,Poisson 流形作为辛流形的推广,为广义 Hamilton 系统提供了一个更好的框架。国外最新的研究成果表明,可用基于能量的 Hamilton 函数作为可能的 Lyapunov 函数,在已建立模型的基础上,给出了带耗散受迫 Hamilton 系统的分析方法[23,24]。我国系统科学和电力工程方面的专家在上述工作的基础上,以电力系统为背景,给出了广义 Hamilton 控制系统的几何框架。他们的基本思想是:通过一类伪 Poisson 流形,对广义 Hamilton 控制系统提供了一个几何结构[25],这类系统具有外部能量供给、内部能量供给及能量消耗等特点。这方面的研究尚属于初级阶段,但由于对其深入研究需要理论上的突破,既有理论难度又有重要的工程实际意义,这就迫使我们要寻求新的思路,才有希望取得新的突破。

本书根据算子半群的理论,用微分算子的语言形式,研究广义 Hamilton 系统及带耗散的广义 Hamilton 系统的几何积分方法。耗散动力学系统是一个广泛的研究领域,有时很难把所研究的系统表示为一个耗散 Hamilton 受控系统,即存在所谓广义 Hamilton 实现问题[26]。广义 Hamilton 实现是一个较新的课题,目前还没有系统有效的实现方法。通常,耗散系统可以用一般非线性微分方程的形式给出。因此,撰著本书的另一个目的在于进一步研究非线性动力学一般方程的李群积分方法。

如前所述,Magnus 级数方法和 Fer 展开方法是经典的李群积分方法,其优点在于,即使适当截断,它们依然保持精确解的几何性质。近几年,Magnus 和 Fer 展开式已经能非常有效地用于数值求解线性矩阵微分方程[8~10,17,27~30],甚至能用于求解李群或齐性

空间上的非线性微分方程[10,29,31]、Hamilton 系统的微分方程[7,32,33]。它们用于求解不同的问题，都得到了比传统数值方法更好的结果。它们不仅保持了真解的定性性质，具有很好的稳定性，而且还特别处理了微分方程依赖时间变量的部分，使数值计算更加精确。然而，到目前为止，Magnus 和 Fer 展开方法主要还是用于求解线性微分方程问题。根据算子半群理论[34]，动力学微分方程系统都可以写成线性映射作用的模型形式，那么，解决线性微分方程问题的几何积分方法和理论就可以用于解决非线性的动力学微分方程问题。

另一方面，文献[35,36]把非线性动力学方程转化为 Minkowski 空间 $\boldsymbol{M}^{n+1}$ 上的李型方程 $\dot{\boldsymbol{X}} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{X}$，$\boldsymbol{X} \in \boldsymbol{M}^{n+1}$，$\boldsymbol{A} \in so(n,1)$，而且自然呈现出一个零锥结构 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g}\boldsymbol{X} = 0$，也就是显现出了原非线性系统在 Minkowski 空间的内在对称群性质。增广动力学系统的空间形式具有很重要的性质，对动力学系统的数值研究具有某种指导意义。基于该空间形式的数值方法不仅可以近似原动力学系统，而且可以尽可能地保持原系统的定性性质和对称性。

鉴于上述，本书主要从两个不同的角度对一般非线性动力学系统进行研究：一个是在算子理论范围内把非线性动力方程表示为一种线性映射作用的模型，便于在线性方程理论上设计新算法；另一个是把动力学系统的构形空间拓广到 Minkowski 空间，使得原动力学方程可以表示为一个李型方程，便于算法设计和程序实现。

近几年，线性微分方程的李群积分法，特别是 Magnus 级数方法和 Fer 展开方法已经得到了很大的发展。可以说，如何将目前的研究成果在非线性的耗散动力学系统中得到深入发展将是一项具有挑战性的课题，否则已取得的成果将失去应有的意义。反之，若这套理论在非线性动力学系统得到了证实和应用，则其在学术上的意义将是深远的。

1.4 主要内容

Hamilton 力学的观点有效地解决了一系列不能用其他方法解决的力学问题，显示了重要的理论价值。从前面对相关领域的历史和现状的介绍可以看出，Hamilton 系统的辛几何算法已得到足够的重视和广泛的研究，并且已经取得了显著的成绩。近来，耗散系统的问题已引起学术界极大的关注。本书论及的工作是国家自然科学基金项目（批准号：10372084 和 10472059）、高等学校博士学科点专项科研基金项目（批准号：20010699016）的基础研究部分，目的就是深入研究耗散系统的对称性质，把 Hamilton 系统辛算法的思想和方法发展到耗散系统的广大领域。本质上，辛算法是一种李群方法。本书基于经典的求解线性微分方程 Magnus 和 Fer 展开式等李群积分的思想和方法，研究了耗散广义 Hamilton 系统以及一般非线性动力学系统的李群积分方法。本书完成的主要工作有：

(1) 研究了非线性动力学系统比较通用的李级数解法、基于 Laplace 逆变换及 Laplace 变换数值反演等一系列新的数值方法。其中，李级数方法是进一步研究非线性动力学方程几何积分方法的重要工具和手段。

把一元微分方程的泰勒展开式推广到 n 维向量空间，研究了求解非线性动力学方程的通用的李级数解法，并给出具体的逐步迭代方法。另外，根据算子半群理论，把非线性动力学微分方程写成线性算子作用的形式，由微分算子的预解式作用于初值后，取其 Laplace 变换的数值反演，经过逐步迭代，构造了一个求解非线性动力学微分方程初值问题的数值方法。该方法简单、有效，而且数值稳定。进一步分析预解式的逆 Laplace 变换，从而再次得到了李级数方法。

(2) 研究了广义 Hamilton 系统和广义 Hamilton 控制系统的保结构算法以及离散梯度积分法。在 Poisson 流形上给出了守恒的广义 Hamilton 系统的保结构算法，其优点在于把原微分方程系统的 Poisson 结构引入积分过程，保持了原来系统的典则特性。对于更广泛的带耗散的广义 Hamilton 系统，就自治系统和非自治系统分别给出了显式的李群积分方法，保持了原动力学系统的李群性质，同时把这种积分方法推广到广义 Hamilton 控制系统。对于广义 Hamilton 系统及广义 Hamilton 控制系统，基于能量的 Hamilton 函数是一个很重要的物理量，本书用离散梯度方法给出了保持其 Hamilton 函数性质特征的数值解法。

(3) 研究了广义 Hamilton 约束系统的李群积分法。对于带约束的耗散广义 Hamilton 系统，通过引入拉格朗日乘子和采用投影技术给出了保持动力学系统内在结构和约束不变性的李群积分法。采用投影技术保证了约束的不变性。向约束流形投影时，通过引入拉格朗日乘子不会破坏原动力学系统的李代数结构。

(4) 研究了一般非线性动力学系统的李群积分方法。一般非线性动力学系统并不是都可以表示为耗散广义 Hamilton 系统形式，即存在所谓广义 Hamilton 实现问题。在耗散广义 Hamilton 系统的保结构算法的基础上，书中进一步更加深入地研究了一般非线性动力学系统的李群积分方法，即基于求解线性微分方程的 Magnus 及 Fer 展开式等李群积分方法的思想，并深入研究了一般非线性动力学系统的李群积分方法。利用函数的李级数展开技巧和 Magnus 级数的对称性质，算法设计中涉及最少数目的交换子的计算，分别给出了包含 1 个、4 个和 10 个交换子的四阶、六阶和八阶 Magnus 型近似格式，并证明了算法是关于时间对称的。同时给出了基于 Fer 展开式的近似方法，并把 Magnus 和 Fer 展开有机地联系起来，简化了 Fer 型积分格式的构造方法，进一步构造了关于时间对称的 Fer 型积分格式。

(5) 研究了一般非线性动力学方程的 RKMK 型积分方法。基于 RKMK 方法,本书将计算指数矩阵的精细积分方法与经典的 Runge-Kutta 方法相结合,在 Minkowski 空间对非线性动力学系统及其增广动力学系统构造了一族简便有效的 RKMK 型积分方法,它们也属于李群方法。

(6) 研究了非线性动力学方程的精细积分方法。由于构造非线性动力学系统的几何积分方法中用到了大量的指数矩阵的计算问题,书中最后将进一步研究指数矩阵的精细算法及其在非线性动力学系统中的应用,简化了精细积分的预处理过程,拓宽了精细积分方法的应用范围。

参考文献

1 Iserles A. Multistep methods on manifolds. Technical Report 1997/NA13, Department of Applied Mathematics and Theoretical Physics. England: University of Cambridge, 1997

2 McLachlan R I, Quispel G R W, Robidoux N. Geometric integration using discrete gradients. Phil. Trans. R. Soc. Lond. A, 1999, 357: 1021 ~ 1045

3 Quispel G R W, Turner G S. Discrete gradient methods for solving ODEs numerically while preserving a first integral. J. Phys. A, 1996, 29: 341 ~ 349

4 Crouch P E, Grossman R. Numerical integration of ordinary differential equations on manifolds. J. Nonlinear Sci. 1993, 3: 1 ~ 33

5 McLachlan R I. On the numerical integration of ordinary differential equations by symmetric composition methods. SIAM J. Sci. Comp. 1995, 16: 151 ~ 168

6 Iserles A, Munthe-Kaas H Z, Nφrsett S P, Zanna A. Lie group methods. Acta Numerica, 2000, 9: 215 ~ 365

7 Cacas F, Oteo J A, Ros J. Lie algebraic approach to Fer's expansion for

classical Hamiltonian systems. J. Phys. A: Math. Gen. 1991, 24(17): 4037 ~ 4041

8 Klarsfeld S, Oteo J A. Exponential infinite-product representations of the time-displacement operator. J. Phys. A: Math. Gen. 1989, 22: 2687 ~ 2694

9 Dieci L, Russell R D, Van Vleck E S. Unitary integrators and applications to continuous othonormalization techniques. SIAM J. Numer. Anal. 1994, 31: 261 ~ 281

10 Iserles A, Nφrsett S P. On the solution of linear differential equations in Lie groups. Phil. Trans. R. Soc., Lond. 1999, A 357: 983 ~ 1019

11 Faltinsen S. Backward error analysis for Lie-group methods. BIT, 2000, 40(4): 652 ~ 670

12 Iserles A. Solving linear ordinary differential equations by exponentials of iterated commutators. Numer. Math. 1984, 45: 183 ~ 199

13 Munthe-Kaas H. Runge-Kutta methods on Lie group. BIT, 1998, 38(1): 92 ~ 111

14 Munthe-Kaas H. High order Runge-Kutta methods on manifolds. Applied Numerical Mathematics, 1999, 29(1): 115 ~ 127

15 Magnus W. On the exponential solution of differential equations for a linear operator. Commun. Pure Appl. Math. 1954, 7: 649 ~ 673

16 Fer F. Résolution de l'equation matricielle $\dot{U} = pU$ par produit infini d'exponentielles matricielles. Bull. Classes Sci. Acad. Roy. Bel. 1958, 44: 818 ~ 829

17 Blanes S, Cacas F, Ros J. Improved high order integrators based on the Magnus expansion. BIT, 2000, 40(3): 434 ~ 450

18 Yoshida H. Construction of higher order symplectic integrators. Physics Letters A, 1990, 150: 262 ~ 268

19 冯康. Hamilton形式体系和辛几何的差分格式 —— 纪念华罗庚教授. 力学未来 15 年国际学术讨论会论文集. 北京:科学出版社,1989

20 Feng Kang. On difference schemes and symplectic geometry. Proc. 1984 Beijing Int. Symp. FengKang, ed. on differential geometry and

differential equation-computation of partial differential equations. Beijing: Science Press, 1985. 42 ～ 58

21 钟万勰,欧阳华江,邓子辰. 计算结构力学与最优控制. 大连:大连理工大学出版社,1993

22 钱学森,钱令希,谈庆明. 力学 —— 迎接 21 世纪挑战. 力学与实践, 1995,17(4): 1 ～ 5

23 Maschke B M J, Ortega R, vander Schaft A J. Energy-based Lyapunov functions for forced Hamiltonian systems with dissipation. Proc. of CDC98, 1998. 3599 ～ 3604

24 Ortega R, Stankovic A, Stefanov P. A passivation approach to power systems stabilization. IFAC Symp. Nonlinear Control Systems Design, Enschede, NL, 1998. 1 ～ 3

25 程代展,席在荣,卢强, 梅生伟. 广义 Hamilton 控制系统的几何结构及其应用. 中国科学(E 辑),2000,30(4): 341 ～ 355

26 王玉振,程代展,李春文. 广义 Hamilton 实现及其在电力系统中的应用. 自动化学报,2002, 28(5): 745 ～ 753

27 Blanes S, Moan P C. Splitting methods for non-autonomous Hamiltonian equations. J. Comput. Phys., 2001, 170(1): 205 ～ 230

28 Blanes S, Cacas F, Ros J. High order optimized geometric integrators for linear differential equations. BIT, 2002, 42(2): 262 ～ 284

29 Zanna A. Collocation and relaxed collocation for the Fer and the Magnus expansions. SIAM J. Numer. Anal., 1999, 36: 1145 ～ 1182

30 Klarsfeld S, Oteo J A. Recursive generation of higher-order terms in the Magnus expansion. Phys. Rev. A, 1989, 39: 3270 ～ 3273

31 Zanna A. The Fer expansion and time-symmetry: A Strang-type approach. Appl. Numer. Math., 2001, 39: 435 ～ 459

32 Sanz-Serna J M. Symplectic integrators for Hamiltonian problems: An overview. Acta. Numerica, 1992, 1: 243 ～ 286

33 Cacas F. Fer's factorization as a symplectic integrator. Numer. Math., 1996, 74(3): 283 ～ 303

34 Pazy A. Semigroups of linear operators and applications to partial

differential equations. New York: Springer-Verlag, 1983

35 Liu C-S. Cone of non-linear dynamical system and group preserving schemes. International Journal of Non-linear Mechanics, 2001, 36: 1047 ~ 1068

36 Hong H-K, Liu C-S. Some physical models with Minkowski spacetime structure and Lorentz group symmetry. International Journal of Non-linear Mechanics, 2001, 36:1075 ~ 1084

第二章　非线性动力学方程的新解法

2.1 引　言

大多数力学问题的本质都是非线性的，非线性是它们固有的特性，它们一般由非线性微分方程来描述。长期以来，力学家和数学家通力合作，借助各种数学分析手段和力学原理，来解决力学领域中的各类非线性动力学方程。他们除了直接寻求方程的封闭形式的解析解之外，还经常用线性化方法化为线性近似方程去求解。然而，理论和实践分析发现，非线性方程在大多数情形下不存在封闭形式的分析解。此外，线性化方法有很大的局限性，它只有在一定条件下才能给出较准确的结果。因此这些方法都不能满足非线性力学问题研究的需要。欲推广微分方程的求解范围，应该放弃解的“有限形式”，而转向寻求“无限形式”的解，如无穷级数解。牛顿(Newton)和莱布尼兹(Leibniz)很早就用级数解法求解过某些微分方程，因此级数解法属于古典解析理论的范畴。有些动力学实际问题的解只有用无穷级数的形式给出才是合理的。例如，守恒系统的广义 Hamilton 微分方程的分析解只有用无穷级数的形式给出[1] 才能保持原系统的几何性质。在数值计算领域中，用泰勒(Taylor)多项式来逼近一个函数，或用于求解常微分方程进而导致各种有效的数值方法已司空见惯，并在很多情况下获得了成功。但有时这种方法的应用却显露出某些缺陷，那就是当计算精度很高时，函数的各阶导数的计算便成为一项相当麻烦的工作。由于科技的发展，特别是计算手段的提高，现在的情况已大大改观。这有

两方面的原因：一是应用软件的日新月异。功能很强的符号计算软件、数值与图像程序软件等数学软件的不断出现与更新，例如，MATLAB与Mathematica等工具软件的出现，使得函数求导数的计算相当方便。二是功能日益强大的计算机使比较复杂的算法得以实现。为此，本书推广了微分方程的幂级数解法[2]，并分别讨论一阶常微分方程组及高阶常微分方程初值问题的求解，给出了所谓的李级数解法。

另外，根据算子半群理论，微分方程可以用微分算子[3~5]（李算子）的语言形式来表示，而微分方程的解（算子）就是对其无穷小生成元的预解式取Laplace逆变换[6]。事实上，Laplace变换及其逆变换在工程技术中有着广泛的应用，特别是在力学系统、电路系统、机电系统和数理经济系统的研究中扮演着重要角色，而且在自动控制理论和随机分析理论的研究中都占有很突出的地位。然而，目前它主要限制在不同领域的线性微分方程问题的研究范围。我们知道，一般情况下，线性系统只是动力学系统的一次近似。因此，对于熟悉Laplace变换的广大科技工作者来说，用Laplace变换研究非线性系统更是具有重要的意义。

本章借助数学手段，对力学领域中经常遇到的非线性动力学方程提出了一系列新的解法，其主要思想为用微分算子的语言形式来表示微分方程，基于微分算子的预解式就是原微分方程的解算子的Laplace变换的基本理论，分别用Laplace逆变换[7~8]、Laplace变换的数值反演[9~11]讨论动力学系统微分方程的求解问题。

2.2 李级数解法

2.2.1 基本方程

在遇到的各类力学问题中，经常出现下列形式的自治微分方

程系统，即

$$\dot{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}),\quad \boldsymbol{x}(0) = \boldsymbol{x}_0 \tag{2.1}$$

其中，$\boldsymbol{x} = (x_1(t), x_2(t), \cdots, x_n(t))^{\mathrm{T}}$，$\dot{\boldsymbol{x}} = (\dot{x}_1, \dot{x}_2, \cdots, \dot{x}_n)^{\mathrm{T}}$，$\dot{x}_i$ 表示 $\boldsymbol{x}$ 的第 i 个分量对时间 t 的导数；$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) = (f_1(\boldsymbol{x}), f_2(\boldsymbol{x}), \cdots, f_n(\boldsymbol{x}))^{\mathrm{T}} = (f_1, f_2, \cdots, f_n)^{\mathrm{T}}$ 是解析矢量值函数；$\boldsymbol{x}_0 = (x_0^{(1)}, x_0^{(2)}, \cdots, x_0^{(n)})^{\mathrm{T}}$ 是时间为零时 $\boldsymbol{x}$ 的初值，T 表示矩阵的转置。根据文献[3]，式(2.1) 的右端 $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})$ 定义了一个线性算子，即

$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{L}(\boldsymbol{x}) = f_1(\boldsymbol{x})\frac{\partial}{\partial x_1} + \cdots + f_n(\boldsymbol{x})\frac{\partial}{\partial x_n} = (f_1, \cdots, f_n)\left(\frac{\partial}{\partial x_1}, \cdots, \frac{\partial}{\partial x_n}\right)^{\mathrm{T}} \tag{2.2}$$

式中，$\left(\frac{\partial}{\partial x_1}, \cdots, \frac{\partial}{\partial x_n}\right)^{\mathrm{T}}$ 是既有矢量性质又有求偏微分特性的矢量偏微分算子。因此，微分方程式(2.1) 可表示为

$$\dot{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{L}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{L}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{x},\quad \boldsymbol{x}(0) = \boldsymbol{x}_0 \tag{2.3}$$

对于非自治动力学系统，即

$$\dot{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}, t),\quad \boldsymbol{x}(0) = \boldsymbol{x}_0 \tag{2.4}$$

令 $x_{n+1} = t$，$\dot{x}_{n+1} = 1$，则原微分方程变为：$\frac{\mathrm{d}\tilde{\boldsymbol{x}}}{\mathrm{d}t} = \tilde{\boldsymbol{f}}(\tilde{\boldsymbol{x}})$，$\tilde{\boldsymbol{x}}(0) = \tilde{\boldsymbol{x}}_0$，这里 $\tilde{\boldsymbol{x}} = (x_1, x_2, \cdots, x_{n+1})^{\mathrm{T}}$，$\tilde{\boldsymbol{f}}(\tilde{\boldsymbol{x}}) = (f_1(\tilde{\boldsymbol{x}}), f_2(\tilde{\boldsymbol{x}}), \cdots, f_n(\tilde{\boldsymbol{x}}), 1)^{\mathrm{T}}$，$\tilde{\boldsymbol{x}}_0 = (x_0^{(1)}, \cdots, x_0^{(n)}, 0)^{\mathrm{T}}$，其与模型式(2.1) 完全相同。

微分方程式(2.1) 及式(2.3) 的解称为向量场 $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})$ 生成的流，它是一个单参数李变换群。求一个给定向量场 $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})$ 生成的流(即求解常微分方程组的初值问题) 叫做对给定向量场 $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})$ 取指数[12]。下面给出求解 $\boldsymbol{N}$ 维常微分方程组通用的指数形式的分析解及其数值解法，称为李级数解法。该方法是常微分方程幂级数解法在 $\boldsymbol{N}$ 维向量空间的推广。

2.2.2 常微分方程组初值问题的李级数解

根据李群的观点，求解常微分方程(组)初值问题式(2.1)及式(2.3)相当于由无穷小变换 $\delta\chi:\boldsymbol{x}_0\rightarrow\boldsymbol{x}_0+\delta\boldsymbol{x}$ 寻求整体变换 $\chi:\boldsymbol{x}_0\rightarrow\boldsymbol{x}(t)$，该整体变换是一单参数李变换群。

定理 2.1 常微分方程(组)初值问题式(2.1)及式(2.3)的解是一单参数变换群，它有指数形式(也称李级数形式)，即

$$x_i(t)=x_i(\boldsymbol{x}_0,t)=\mathrm{e}^{tL}x_i\,\|_{\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}_0},\ i=1,2,\cdots,n \tag{2.5}$$

式中，微分算子 $\mathrm{e}^{tL}=\sum\limits_{n=0}^{\infty}\dfrac{t^n}{n!}\boldsymbol{L}^n$。

式(2.5)也称李级数解。

证明 沿积分曲线 $x_i=x_i(t),i=1,2,\cdots,n$，有

$$\frac{\mathrm{d}x_i}{\mathrm{d}t}=\left(\frac{\mathrm{d}x_1}{\mathrm{d}t},\frac{\mathrm{d}x_2}{\mathrm{d}t},\cdots,\frac{\mathrm{d}x_n}{\mathrm{d}t}\right)\left(\frac{\partial x_i}{\partial x_1},\frac{\partial x_i}{\partial x_2},\cdots,\frac{\partial x_i}{\partial x_n}\right)^{\mathrm{T}}=$$

$$(f_1,f_2,\cdots,f_n)\left(\frac{\partial x_i}{\partial x_1},\frac{\partial x_i}{\partial x_2},\cdots,\frac{\partial x_i}{\partial x_n}\right)^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{L}x_i$$

$$\frac{\mathrm{d}^2x_i}{\mathrm{d}t^2}=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\mathrm{d}x_i}{\mathrm{d}t}\right)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\boldsymbol{L}x_i)=$$

$$\frac{\mathrm{d}x_1}{\mathrm{d}t}\frac{\partial}{\partial x_1}[\boldsymbol{L}x_i]+\frac{\mathrm{d}x_2}{\mathrm{d}t}\frac{\partial}{\partial x_2}[\boldsymbol{L}x_i]+\cdots+\frac{\mathrm{d}x_n}{\mathrm{d}t}\frac{\partial}{\partial x_n}[\boldsymbol{L}x_i]=$$

$$\left(\frac{\mathrm{d}x_1}{\mathrm{d}t},\frac{\mathrm{d}x_2}{\mathrm{d}t},\cdots,\frac{\mathrm{d}x_n}{\mathrm{d}t}\right)\left(\frac{\partial}{\partial x_1},\frac{\partial}{\partial x_2},\cdots,\frac{\partial}{\partial x_n}\right)^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{L}x_i)=$$

$$\boldsymbol{L}(\boldsymbol{L}x_i)=\boldsymbol{L}^2x_i$$

…………………

$$\frac{\mathrm{d}^nx_i}{\mathrm{d}t^n}=\boldsymbol{L}^nx_i$$

…………………

$$x_i(t)=x_i(\boldsymbol{x}_0,t)=$$

$$x_i^{(0)}+t\frac{\mathrm{d}x_i}{\mathrm{d}t}(\boldsymbol{x}_0)+\frac{t^2}{2!}\frac{\mathrm{d}^2x_i}{\mathrm{d}t^2}(\boldsymbol{x}_0)+\cdots+\frac{t^n}{n!}\frac{\mathrm{d}^nx_i}{\mathrm{d}t^n}(\boldsymbol{x}_0)+\cdots=$$

$$\left[x_i + t\boldsymbol{L}x_i + \frac{1}{2!}t^2\boldsymbol{L}^2x_i + \cdots + \frac{1}{n!}t^n\boldsymbol{L}^n x_i + \cdots\right]_{x=x_0} =$$

$$\mathrm{e}^{t\boldsymbol{L}}x_i \parallel_{x=x_0}, \quad i = 1,2,\cdots,n$$

显然，当 $f \in C^\infty$ 时，李级数解式(2.5) 在 $t = 0$ 的某邻域收敛。

那么，对于任一个函数 $\boldsymbol{\Phi} = \boldsymbol{\Phi}(\boldsymbol{x})$（它不明显含有 t，但通过 $\boldsymbol{x}$ 而依赖于 t），有

$$\boldsymbol{\Phi}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{\Phi}(\boldsymbol{x}_0) + t\boldsymbol{L}\boldsymbol{\Phi} + \frac{t^2}{2}\boldsymbol{L}^2\boldsymbol{\Phi} + \cdots = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{t^n}{n!}\boldsymbol{L}^n\boldsymbol{\Phi} \tag{2.6}$$

式(2.6) 称为 $\boldsymbol{\Phi}(\boldsymbol{x})$ 的李级数展开。采用级数形式的微分算子为 $\mathrm{e}^{t\boldsymbol{L}} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{t^n}{n!}\boldsymbol{L}^n$，则上述李级数展开式可以写成

$$\boldsymbol{\Phi}(\boldsymbol{x}) = \mathrm{e}^{t\boldsymbol{L}}[\boldsymbol{\Phi}(\boldsymbol{x}_0)] \tag{2.7}$$

根据定理 2.1，有 $\boldsymbol{x} = \mathrm{e}^{t\boldsymbol{L}}\boldsymbol{x}_0$，代入式(2.7)，得

$$\boldsymbol{\Phi}(\mathrm{e}^{t\boldsymbol{L}}\boldsymbol{x}_0) = \mathrm{e}^{t\boldsymbol{L}}[\boldsymbol{\Phi}(\boldsymbol{x}_0)] \tag{2.8}$$

式(2.8) 被称为李级数的可换定理。

2.2.3　李级数数值方法

把李级数解式(2.5) 表示为显式，即

$$x_i(t) = \mathrm{e}^{t\boldsymbol{L}}x_i \parallel_{x=x_0} =$$

$$\left[x_i + t\boldsymbol{L}x_i + \frac{1}{2!}t^2\boldsymbol{L}^2x_i + \cdots + \frac{1}{n!}t^n\boldsymbol{L}^n x_i + \cdots\right]_{x=x_0}$$

记 $L_i^k = L_i^k(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{L}^k x_i, L_i^0 = x_i$，则 $L_i^1 = L_i^1(\boldsymbol{x}) = f_i$，定义 $1 \times n$ 矩阵函数 $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{f}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x}) = (f_1, f_2, \cdots, f_n)$，那么 $L_i^2(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{F}\cdot\left(\frac{\partial L_i^1}{\partial \boldsymbol{x}}\right)$，其中，$\frac{\partial L_i^1}{\partial \boldsymbol{x}}$ 是函数 L_i^1 的梯度，即

$$\frac{\partial L_i^1}{\partial \boldsymbol{x}} = \left(\frac{\partial L_i^1}{\partial x_1}, \frac{\partial L_i^1}{\partial x_2}, \cdots, \frac{\partial L_i^1}{\partial x_n}\right)^{\mathrm{T}}$$

则 $L_i^k(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{F}\cdot\left(\frac{\partial L_i^{k-1}}{\partial \boldsymbol{x}}\right)$，$k = 1,2,\cdots$。那么 $x_i(t) = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{t^k}{k!}L_i^k \parallel_{x=x_0}$，

$i=1,2,\cdots,n$。只要 $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})$ 足够光滑，便可以方便地得到任意精度要求的数值解。根据计算精度的要求，截取李级数展开式的前 $m+1$ 项，可得 m 阶近似解。设步长为 h，记 $x_k^{(i)}$ 为第 k 次迭代值，那么，$x_1^{(i)}=x_i(\boldsymbol{x}_0,h)=x_0^{(i)}+hL_i^1(\boldsymbol{x}_0)+\cdots+\dfrac{h^m}{m!}L_i^m(\boldsymbol{x}_0)$，$i=1,2,\cdots,n$，这是第一次迭代值，由此得到 $\boldsymbol{x}_1=(x_1^{(1)},x_1^{(2)},\cdots,x_1^{(n)})$，第 k 次迭代值为 $x_k^{(i)}=x_i(\boldsymbol{x}_{k-1},h)$，$i=1,2,\cdots,n$；$k=1,2,\cdots$，如此可得 m 阶精度的数值解。

对于复杂动力学系统的微分方程式(2.1)和式(2.3)，可以通过分裂合成的方法[13]（第三章还将进一步介绍）进行求解。也就是说，如果线性算子 $\boldsymbol{L}(\boldsymbol{x})$ 能分裂成不可交换的两部分 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})$ 和 $\boldsymbol{B}(\boldsymbol{x})$，即 $[\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}]=\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}-\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{A}\neq\boldsymbol{0}$，而且，将 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 看做独立的线性算子时，它们对应的微分方程便能精确求解或较容易求解。那么，由李级数解法求解较为简单的微分方程 $\dot{\boldsymbol{x}}=\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{x}$ 和 $\dot{\boldsymbol{x}}=\boldsymbol{B}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{x}$ 可得它们的解分别为 $\boldsymbol{x}(t)=\exp(t\boldsymbol{A})\boldsymbol{x}_0$ 和 $\boldsymbol{x}(t)=\exp(t\boldsymbol{B})\boldsymbol{x}_0$。因此由对称合成的积分方法可得原微分方程的解 $\boldsymbol{x}(t)=\exp(t\boldsymbol{L})\boldsymbol{x}_0$。最后可获得原动力学方程的 m 阶近似格式，即

$$\boldsymbol{x}_{k+1}=\exp(h\boldsymbol{L})\boldsymbol{x}_k=\Big(\prod_{i=1}^{n}\exp(c_ih\boldsymbol{A})\exp(d_ih\boldsymbol{B})\Big)\boldsymbol{x}_k+O(h^{m+1}),\ k=0,1,2,\cdots \tag{2.9}$$

当 $m=2$（二阶积分），最简单的形式是 $n=2$，$c_1=c_2=\dfrac{1}{2}$，$d_1=1$，$d_2=0$。当 $m=4$，有四阶积分公式为

$$\boldsymbol{x}_{k+1}=\exp(h\boldsymbol{L})\boldsymbol{x}_k=\prod_{i=1}^{4}\exp(c_ih\boldsymbol{A})\exp(d_ih\boldsymbol{B})\boldsymbol{x}_k+O(h^5),\ k=0,1,2,\cdots \tag{2.10}$$

其中
$$\left.\begin{aligned}&c_1 = c_4 = \frac{1}{2(1+\alpha)},\quad d_1 = d_3 = \frac{1}{1+\alpha}\\&c_2 = c_3 = \frac{\alpha}{2(1+\alpha)},\quad d_2 = \frac{\alpha-1}{1+\alpha},\quad d_4 = 0\\&\alpha = 1 - 2^{1/3}\end{aligned}\right\}\tag{2.11}$$

由后面第五章的讨论可知,李级数方法对于自治系统是一个李群方法。

2.2.4　N 阶常微分方程的解法

对于高阶常微分方程

$$\left.\begin{aligned}&x^{(n)} = g(x,x',\cdots,x^{(n-1)}),\ x\in R\\&x(0) = x_0^{(1)},x'(0) = x_0^{(2)},\cdots,x^{(n-1)}(0) = x_0^{(n)}\end{aligned}\right\}\tag{2.12}$$

记 $x_i(t) = x^{(i-1)}(t)$, $i = 1,2,\cdots,n$,则式(2.12)可化为一阶微分方程组

$$\begin{cases}\dot{x}_1 = x_2\\\dot{x}_2 = x_3\\\quad\vdots\\\dot{x}_n = g(x_1,x_2,\cdots,x_{n-1})\\x_i(0) = x_0^{(i)},\quad i = 1,2,\cdots,n\end{cases}$$

进一步得出 $x_i(t) = x_0^{(i)} + t\,\boldsymbol{L}x_i + \cdots + \frac{t^m}{m!}\boldsymbol{L}^m x_i + \cdots$, $|t| < \delta$, $i = 1,2,\cdots,n$,其中 δ 是某一正数。微分算子 $\boldsymbol{L} = (x_2,\cdots,x_n,g)\left(\frac{\partial}{\partial x_1},\cdots,\frac{\partial}{\partial x_n}\right)^{\mathrm{T}}$,那么,$x(t) = x_1(t)$。

下面构造式(2.12)的 $m(m\geqslant n)$ 阶精度的数值解。

记 $L_i^k = \boldsymbol{L}^k x_i$, $i = 1,2,\cdots,n$; $k = 1,2,\cdots,m$,不难证明:

$$L_1^1 = x_2,\ L_1^k = x_{k+1},\ k = 1,2,\cdots,n-1,$$

$$L_1^n = g,\ L_1^{n+1} = \boldsymbol{L}L_1^n,\ \cdots,\ L_1^m = \boldsymbol{L}L_1^{m-1};$$

$$L_2^k = L_1^{k+1},\ k = 1,2,\cdots,m-1,\ L_2^m = \boldsymbol{L}L_1^m$$

即 $\qquad L_i^k = L_{i-1}^{k+1},\ k = 1,2,\cdots,m-1,\ i = 1,2,\cdots,n$

$$L_i^m = \boldsymbol{L}\, L_{i-1}^m$$

可见，只须计算 $L_1^{n+1},\cdots,L_1^m$ 以及 $L_i^m,\ i = 2,3,\cdots,n$ 即可，且 $L_i^m = \boldsymbol{L}(L_{i-1}^m)$。所求 $x(kh) = x_1(kh),k = 1,2,\cdots$。由上述可知，对于求解高阶常微分方程的初值问题，该方法尤其经济、有效。

2.2.5 算例

【例 2.1】 非线性周期系统响应问题[14]：

$$\begin{cases} \dot{x}_1 = x_2 \\ \dot{x}_2 = -2.25x_1 - (x_1 - 1.5\sin t)^3 + 2\sin t \\ x_1(0) = 0.0,\ x_2(0) = 1.599\ 29 \end{cases}$$

其精确解为

$$\begin{cases} x_1(t) = 1.599\ 41\sin t - 0.000\ 04\sin 3t \\ x_2(t) = 1.599\ 41\cos t - 0.000\ 12\cos 3t \end{cases}$$

采用四阶精度数值方法，步长 $h = 0.1$，近似解与精确解比较所得误差如图 2.1 和图 2.2 所示。采用二阶精度数值方法（以便与后文计算结果相比较），其误差变化如图 2.3 和图 2.4 所示。

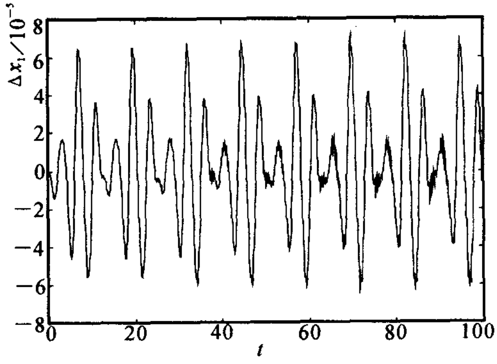


图 2.1 变量 x_1 的误差

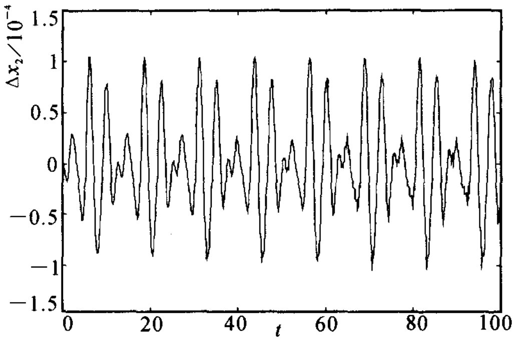


图 2.2　变量 x_2 的误差

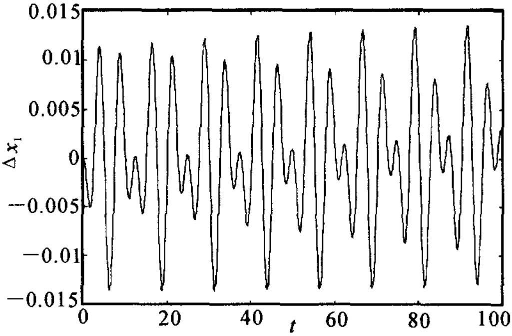


图 2.3　变量 x_1 的误差

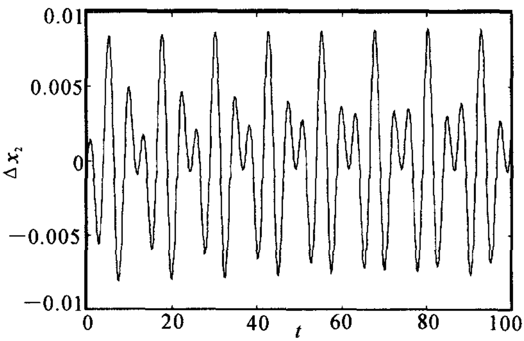


图 2.4　变量 x_2 的误差

2.3 基于 Laplace 逆变换数值求解非线性动力学方程的新方法

2.3.1 数学理论

考虑如下形式的常微分方程初值问题：

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{x}}{\mathrm{d}t}-\boldsymbol{L}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0},\ \boldsymbol{x}(0)=\boldsymbol{x}_0 \tag{2.13}$$

式中，$\boldsymbol{L}$ 是一个线性算子。根据算子半群理论[6] 可知，$\boldsymbol{L}$ 的预解式 $\boldsymbol{R}(\lambda;\boldsymbol{L})=(\lambda\boldsymbol{I}-\boldsymbol{L})^{-1}$ 是微分方程式(2.13) 的解（算子）的 Laplace 变换。因此，期望通过取 $\boldsymbol{L}$ 的预解式的逆 Laplace 变换得到微分方程的解。本节通过逐步近似计算算子 $\boldsymbol{L}$ 的预解式的 Laplace 逆变换来求解动力学微分方程。首先介绍相关理论。

1. 有界线性算子半群及其无穷小生成元

定义 2.1 设 $\boldsymbol{X}$ 是 Banach 空间，$\boldsymbol{T}(t)(0\leqslant t<\infty)$ 是映射 $\boldsymbol{X}$ 到 $\boldsymbol{X}$ 内的有界线性算子的单参数族；如果

(1) $\boldsymbol{T}(0)=\boldsymbol{I}$（$\boldsymbol{I}$ 是 $\boldsymbol{X}$ 上的恒等算子）；

(2) $\boldsymbol{T}(t+s)=\boldsymbol{T}(t)\boldsymbol{T}(s)$ 对一切 $t,s\geqslant 0$ 成立（半群性质）；

则称 $\boldsymbol{T}(t)(0\leqslant t<\infty)$ 是 $\boldsymbol{X}$ 上的有界线性算子半群。

定义 2.2 命题

$$\boldsymbol{D}(\boldsymbol{L})=\left\{\boldsymbol{x}\in\boldsymbol{X}:\lim_{t\to 0^+}\frac{\boldsymbol{T}(t)\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}}{t}\text{存在}\right\} \tag{2.14}$$

对于 $\boldsymbol{x}\in\boldsymbol{D}(\boldsymbol{L})$，有

$$\boldsymbol{L}\boldsymbol{x}=\lim_{t\to 0^+}\frac{\boldsymbol{T}(t)\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}}{t}=\frac{\mathrm{d}^+\boldsymbol{T}(t)\boldsymbol{x}}{\mathrm{d}t}\bigg|_{t=0} \tag{2.15}$$

则称线性算子 $\boldsymbol{L}$ 是半群 $\boldsymbol{T}(t)$ 的无穷小生成元，$\boldsymbol{D}(\boldsymbol{L})$ 是 $\boldsymbol{L}$ 的定义域。

定义 2.3 Banach 空间 $\boldsymbol{X}$ 上的有界线性算子半群 $\boldsymbol{T}(t)(0\leqslant$

$t < \infty$）称为有界线性算子强连续半群，如果

$$\lim_{t \to 0^+} \boldsymbol{T}(t)\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x} \tag{2.16}$$

对一切 $\boldsymbol{x} \in \boldsymbol{X}$ 成立，一个 $\boldsymbol{X}$ 上的有界线性算子强连续半群将称为一个 $\boldsymbol{C}_0$ 类半群，或简称为一个 $\boldsymbol{C}_0$ 半群。

2. 线性算子 $\boldsymbol{L}$ 的预解式

定义 2.4　如果 $\boldsymbol{L}$ 是 $\boldsymbol{X}$ 中的一个线性算子（不必是有界的），那么 $\boldsymbol{L}$ 的预解集 $\boldsymbol{\rho}(\boldsymbol{L})$ 是使 $\lambda\boldsymbol{I} - \boldsymbol{L}$ 可逆，且 $(\lambda\boldsymbol{I} - \boldsymbol{L})^{-1}$ 是 $\boldsymbol{X}$ 中有界线性算子的一切复数 λ 的集合。有界线性算子族 $\boldsymbol{R}(\lambda;\boldsymbol{L}) = (\lambda\boldsymbol{I} - \boldsymbol{L})^{-1}$，$\lambda \in \boldsymbol{\rho}(\boldsymbol{L})$，称为 $\boldsymbol{L}$ 的预解式。

定理 2.2　设 $\boldsymbol{L}$ 是 $\boldsymbol{X}$ 上一个有界线性算子。如果 $\gamma > \|\boldsymbol{L}\|$，则

$$\mathrm{e}^{t\boldsymbol{L}} = \frac{1}{2\pi i}\int_{\gamma-\infty}^{\gamma+\infty} \mathrm{e}^{\lambda t}\boldsymbol{R}(\lambda;\boldsymbol{L})\mathrm{d}\lambda \tag{2.17}$$

方程式(2.17)中的收敛是依一致算子拓扑的，并且在 t 的有界区间上是一致的。

定理 2.3　设 $\boldsymbol{L}$ 是满足 $\|\boldsymbol{T}(t)\| \leqslant M\mathrm{e}^{\omega t}$ 的 $\boldsymbol{C}_0$ 半群 $\boldsymbol{T}(t)$ 的无穷小生成元；又设 $\gamma > \max\{0,\omega\}$，对 $\boldsymbol{x} \in \boldsymbol{D}(\boldsymbol{L}^2)$，则

$$\boldsymbol{T}(t)\boldsymbol{x} = \frac{1}{2\pi i}\int_{\gamma-\infty}^{\gamma+\infty} \mathrm{e}^{\lambda t}\boldsymbol{R}(\lambda;\boldsymbol{L})\boldsymbol{x}\mathrm{d}\lambda \tag{2.18}$$

并且对每一 $\delta > 0$，积分关于 t 在 $t \in [\delta, 1/\delta]$ 上一致收敛。

根据李群理论，由定理 2.2 和定理 2.3 可知，$\boldsymbol{T}(t)\boldsymbol{x}_0$ 是微分方程初值问题式(2.13)的解。又根据定理 2.3，可以得到：如果 $\|\boldsymbol{T}(t)\| \leqslant M\mathrm{e}^{\omega t}$，则

$$\boldsymbol{R}(\lambda;\boldsymbol{L})\boldsymbol{x} = \int_0^{\infty} \mathrm{e}^{-\lambda t}\boldsymbol{T}(t)\boldsymbol{x}\mathrm{d}t \tag{2.19}$$

对于 $\boldsymbol{x} \in \boldsymbol{X}$，$\mathrm{Re}(\lambda) > \omega$ 成立。即 $\boldsymbol{L}$ 的预解式是半群 $\boldsymbol{T}(t)$ 的 Laplace 变换。因此我们期望通过对 $\boldsymbol{L}$ 的预解式的逆 Laplace 变换得到半群 $\boldsymbol{T}(t)$。

2.3.2 数值方法

Laplace 变换是数学物理领域中的一种重要的分析工具，在各种自然科学与工程技术部门有着广泛的应用。特别是在力学系统、电路系统、机电系统、数理经济系统以及自动控制和随机分析中都具有广泛的应用。然而，目前它主要被限制在不同领域的线性微分方程问题的研究范围。基于上述基本理论，下面将运用 Laplace 变换及其逆变换的方法和手段，求解一般非线性动力学系统的问题。任意非线性动力学系统都可以写成微分方程系统，即式(2.1)或式(2.4)的形式。讨论一般的非线性动力学微分方程系统即式(2.1)及式(2.4)的求解问题，可将其对应写成式(2.13)的方程形式，其中的线性算子 $\boldsymbol{L}$ 分别是

$$\boldsymbol{L} = f_1(\boldsymbol{x})\frac{\partial}{\partial x_1} + \cdots + f_n(\boldsymbol{x})\frac{\partial}{\partial x_n} = (f_1, \cdots, f_n)\left(\frac{\partial}{\partial x_1}, \cdots, \frac{\partial}{\partial x_n}\right)^{\mathrm{T}} \tag{2.20}$$

$$\boldsymbol{L} = f_1(\boldsymbol{x}, t)\frac{\partial}{\partial x_1} + \cdots + f_n(\boldsymbol{x}, t)\frac{\partial}{\partial x_n} + \frac{\partial}{\partial t} = (f_1, \cdots, f_n, 1)\left(\frac{\partial}{\partial x_1}, \cdots, \frac{\partial}{\partial x_n}, \frac{\partial}{\partial t}\right)^{\mathrm{T}} \tag{2.21}$$

把 $\boldsymbol{L}$ 的预解式 $\boldsymbol{R}(\lambda;\boldsymbol{L}) = (\lambda\boldsymbol{I} - \boldsymbol{L})^{-1}$ 展开为一致收敛的关于算子 $\boldsymbol{L}$ 的无穷级数

$$\boldsymbol{R}(\lambda;\boldsymbol{L}) = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{\boldsymbol{L}^k}{\lambda^{k+1}} \tag{2.22}$$

由前一节可知，解算子 $\boldsymbol{T}(t)$ 是 $\boldsymbol{L}$ 的预解式的 Laplace 逆变换，根据式(2.22)逐项对 λ 作 Laplace 逆变换[6~7]，可得解算子为

$$\boldsymbol{T}(t) = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{t^k}{k\,!}\boldsymbol{L}^k \tag{2.23}$$

取 h 为时间步长，把式(2.20)或式(2.21)代入式(2.23)，并截取其前 $m+1$ 项作为 $\boldsymbol{T}(t)$ 的近似。从 $\boldsymbol{x}_0$ 逐步迭代便可近似求解微分方程初值问题式(2.13)，进而求解非线性动力学微分方程式(2.1)及式(2.4)。

式(2.23)中算子作用于 $\boldsymbol{x}_0$，就是分别作用于 $\boldsymbol{x}_0$ 的每一个分量，即

$$\boldsymbol{T}(h)x_0^{(i)} = \sum_{k=0}^{m} \frac{h^k}{k!}\boldsymbol{L}^k(\boldsymbol{x}_0,0)x_0^{(i)},\ i=1,2,\cdots,n \tag{2.24}$$

式中，$x_0^{(i)}$ 表示 $\boldsymbol{x}_0$ 的第 i 个分量。这样可得到 $t=h$ 时的方程组的近似解 $x_1^{(i)} = \boldsymbol{T}(h)x_0^{(i)}, i=1,2,\cdots,n$，即得到 $\boldsymbol{x}_1 = (x_1^{(1)},x_1^{(2)},\cdots,x_1^{(n)})^{\mathrm{T}}$。如此迭代，当 $t=kh$ 时，方程组的近似解为 $\boldsymbol{x}_k=(x_k^{(1)},x_k^{(2)},\cdots,x_k^{(n)})^{\mathrm{T}},\ k=1,2,\cdots$。其中，$x_k^{(i)}$ 为

$$x_k^{(i)} = \boldsymbol{T}(h)x_{k-1}^{(i)} = \sum_{k=0}^{m}\frac{h^k}{k!}\boldsymbol{L}^k(\boldsymbol{x}_{k-1},h)x_{k-1}^{(i)},\ i=1,2,\cdots,n \tag{2.25}$$

由上可见式(2.25)与式(2.5)相同，因此式(2.25)同李级数解法。

2.3.3　特例——线性常微分方程的求解

对于线性常微分方程问题

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{x}}{\mathrm{d}t}-\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0},\ \boldsymbol{x}(0)=\boldsymbol{x}_0 \tag{2.26}$$

式中，$\boldsymbol{B}$ 是一个定常矩阵，所对应的预解式为关于定常矩阵 $\boldsymbol{B}$ 的无穷级数，即

$$\boldsymbol{R}(\lambda;\boldsymbol{B}) = (\lambda\boldsymbol{I}-\boldsymbol{B})^{-1} = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{\boldsymbol{B}^k}{\lambda^{k+1}} \tag{2.27}$$

对应于预解式(2.27)的 Laplace 逆变换是

$$\boldsymbol{T}(t) = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{t^k}{k!}\boldsymbol{B}^k = \exp(t\boldsymbol{B}) \tag{2.28}$$

因此，方程式(2.26)的解为

$$\boldsymbol{x}(t)=\boldsymbol{T}(t)\boldsymbol{x}_0=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{t^k}{k\,!}\boldsymbol{B}^k\boldsymbol{x}_0=\exp(t\boldsymbol{B})\boldsymbol{x}_0 \qquad (2.29)$$

展开式(2.29)没有被截断，所以得到了精确解。

2.3.4 算例

【例 2.2】 考虑如下受迫 Duffing 方程：

$$\begin{cases}\dot{x}_1=x_2\\ \dot{x}_2=-\gamma x_2-\alpha x_1-\beta x_1^3+f_0\cos\omega t\end{cases}$$

式中，α，β 及 γ 是物理参数，f_0 是频率为 ω 的外部激励的振幅。当 $\omega=1.2$，$\alpha=-1$，$\beta=1$，$\gamma=0.3$，振幅分别为 $f_0=0.2$，0.27 及 0.286 7 时，由图 2.5 至图 2.7 所示的数值结果可知它们分别是一周期、二周期及四周期响应。图中没有画出始于初始点 $x_1=2$ 及 $x_2=0$ 的暂态轨线部分。当 $\gamma=0$ 及 $f_0=0$ 时，它是一个守恒系统，有守恒的能量函数 $H=\frac{1}{2}x_2^2-\frac{1}{2}x_1^2+\frac{1}{4}x_1^4\equiv 2$。图 2.8 给出了能量函数的误差 ΔH。其中截取了前四项，时间步长取 $h=0.1$。

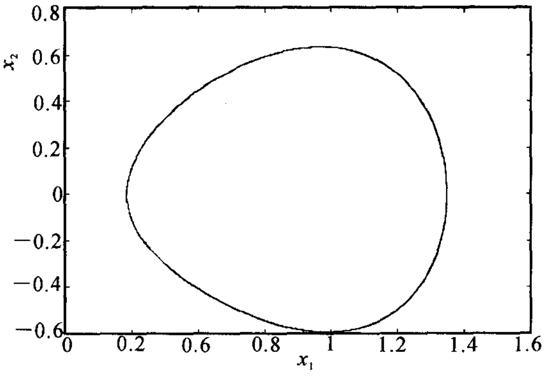


图 2.5　$f_0=0.2$ 的一周期响应

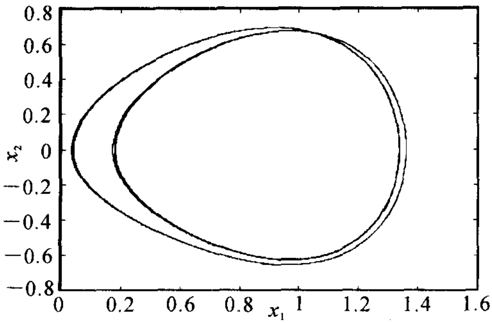


图 2.6　$f_0 = 0.27$ 的二周期响应

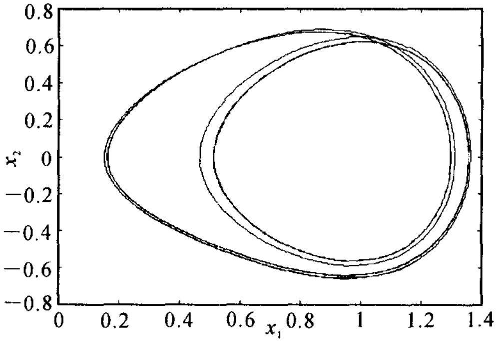


图 2.7　$f_0 = 0.286\,7$ 的四周期响应

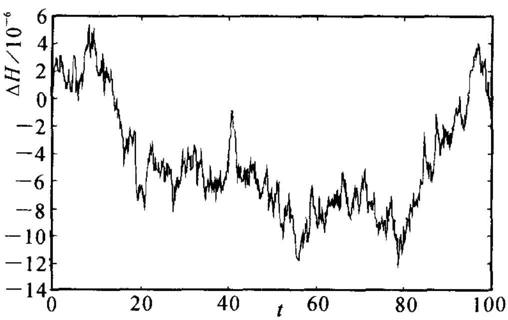


图 2.8　能量函数 H 的误差

2.4 基于 Laplace 数值反演的新方法

2.4.1 关于函数的 Laplace 变换的数值反演方法

设 Laplace 变换 $F(\lambda)$ 的反演为 $f(t)$，则

$$F(\lambda) = \int_0^{\infty} e^{-\lambda t} f(t)\mathrm{d}t$$

或
$$F(\lambda) = \int_0^{\infty} e^{-t}[f(t)e^{-(\lambda-1)t}]\mathrm{d}t, \quad \mathrm{Re}(\lambda) > \sigma_0 \tag{2.30}$$

利用 Gauss-Lagurrer 求积公式计算式(2.30) 等号右端的广义积分，可得到

$$F(\lambda) \approx \sum_{k=1}^{n} B_k f(t_k) e^{(-\lambda-1)t_k} \tag{2.31}$$

式中，t_k 是求积公式的结点，B_k 是相应的权系数。在上式中取 λ 的 n 个值 $\lambda = \lambda_0, \lambda_1, \cdots, \lambda_{n-1}$，则由式(2.31) 得到方程组

$$F(\lambda_r) = \sum_{k=1}^{n} B_k \tilde{f}(t_k) e^{-(\lambda_r-1)t_k}, \; r = 0,1,\cdots,n-1 \tag{2.32}$$

通过解方程组式(2.32) 就能得到反演 $f(t)$ 的 n 个近似值 $\tilde{f}(t_k)$，$k = 1,2,\cdots,n$。

由 Laplace 变换的性质知 $f(t) = O(e^{\omega t}), t \to \infty$，所以

$$f(t)e^{-(\lambda-1)t} = O(e^{-(\lambda-\omega-1)t}), \quad t \to \infty$$

式(2.31) 对于 $f(t)e^{-(\lambda-1)t} \in p_{2n-1}$ 时精确成立(p_{2n-1} 为次数低于 $2n-1$ 次的多项式的集合)，故取 $\lambda = \lambda_r, r = 0,1,\cdots,n-1$，使 $\lambda_r - \omega - 1 \approx 0$，这时

$$f(t)e^{-(\lambda-1)t} = O(1), \quad t \to \infty$$

于是取

$$\lambda_r = \omega + 1 + r/M, \; r = 0,1,\cdots,n-1$$

式中，M是大的正数(通常取$M \geqslant 100$)。这时由式(2.32) 可得到下

列方程组：

$$F(\omega+1+r/M)=\sum_{k=1}^{n}B_k\tilde{f}(t_k)\mathrm{e}^{-(\omega+r/M)t_k},\quad r=0,1,\cdots,n-1 \tag{2.33}$$

为求更多的反演值，在式(2.30) 中可以作变换 $t=s\tau, s>0$，则

$$F(\lambda)=s\int_0^{\infty}\mathrm{e}^{-\lambda s\tau}f(s\tau)\mathrm{d}\tau$$

与推导式(2.33) 相似，有

$$F\left(\omega+\frac{1+r/M}{s}\right)=s\sum_{k=1}^{n}B_k\tilde{f}(s\tau_k)\mathrm{e}^{-(\omega s+r/M)\tau_k},\quad r=0,1,\cdots,n-1 \tag{2.34}$$

2.4.2 基于 Laplace 变换数值反演的非线性动力学方程的新算法

根据式(2.31) 进行数值反演，以求微分方程初值问题式(2.13) 以及式(2.1) 和式(2.4) 的解。根据式(2.19) 及式(2.30)，有

$$\boldsymbol{R}(\lambda;\boldsymbol{L})\boldsymbol{x}_0=\int_0^{\infty}\mathrm{e}^{-t}[\mathrm{e}^{-(\lambda-1)t}\boldsymbol{T}(t)\boldsymbol{x}_0]\mathrm{d}t \tag{2.35}$$

对于式(2.35) 等号左端，可以把 $\boldsymbol{L}$ 的预解式展开为一致收敛的关于算子 $\boldsymbol{L}$ 的无穷级数，即

$$\boldsymbol{R}(\lambda;\boldsymbol{L})=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{\boldsymbol{L}^k}{\lambda^{k+1}} \tag{2.36}$$

取 $\lambda>0$ 足够大，适当截断式(2.36) 便可得到 $\boldsymbol{L}$ 的预解式的近似值。同时利用 Gauss-Lagurrer 求积公式计算式(2.35) 等号右端的广义积分，则可得到

$$\sum_{k=0}^{m}\frac{\boldsymbol{L}^k}{\lambda^{k+1}}\boldsymbol{x}_0\approx\sum_{k=1}^{n}B_k\mathrm{e}^{-(\lambda-1)t_k}\boldsymbol{T}(t_k)\boldsymbol{x}_0 \tag{2.37}$$

作变换 $t=s\tau, s>0$，由式(2.34)，有

$$\sum_{k=0}^{m}\left[\boldsymbol{L}^k/\left(\omega+\frac{1+r/M}{s}\right)^{k+1}\right]\boldsymbol{x}_0=s\sum_{k=1}^{n}B_k\mathrm{e}^{-(\omega s+r/M)\tau_k}\boldsymbol{T}(s\tau_k)\boldsymbol{x}_0,$$
$$r=0,1,\cdots,n-1 \tag{2.38}$$

式中，τ_k，B_k 分别是n 阶 Gauss-Lagurrer 求积公式的结点和相应的权系数。选择适当的$s>0$，使得$h=s\tau_1$ 满足精度要求，然后以h为时间步长，从 $\boldsymbol{x}_0$ 逐步迭代便可求解微分方程初值问题式(2.13)，进而求解非线性动力学微分方程式(2.1)及式(2.4)。

在式(2.35)，式(2.37)及式(2.38)中算子作用于 $\boldsymbol{x}_0$，即分别作用于 $\boldsymbol{x}_0$ 的每一个分量。为解方程组式(2.38)，需要求解 n 个(n 是 $\boldsymbol{x}_0$ 的维数)方程组，即

$$\boldsymbol{R}\left(\omega+\frac{1+r/M}{s};\boldsymbol{L}\right)x_0^{(i)}=s\sum_{k=1}^{n}B_k\mathrm{e}^{-(\omega s+r/M)\tau_k}\boldsymbol{T}(s\tau_k)x_0^{(i)},$$
$$r=0,1,\cdots,n-1,\ i=1,2,\cdots,n \tag{2.39}$$

其中，为简便记，依然采用了预解式的记号，即

$$\boldsymbol{R}\left(\omega+\frac{1+r/m}{s};\boldsymbol{L}\right)\boldsymbol{x}_0=\sum_{k=0}^{m}\left[\boldsymbol{L}^k/\left(\omega+\frac{1+r/M}{s}\right)^{k+1}\right]\boldsymbol{x}_0 \tag{2.40}$$

$x_0^{(i)}$ 表示 $\boldsymbol{x}_0$ 的第i个分量。后面可见实际运作中的计算量与解一个方程组相同。

设 $u_i\neq u_j,i,j=1,2,\cdots,n,\ l_s(u)=\sum_{r=0}^{n-1}l_s^{(r)}u^r(s=1,2,\cdots,n)$ 是以 $u_i(i=1,2,\cdots,n)$ 为节点的 Lagrange 插值基多项式，则 Vandermonde 矩阵

$$\begin{bmatrix}1 & 1 & \cdots & 1\\ u_1 & u_2 & \cdots & u_n\\ u_1^2 & u_2^2 & \cdots & u_n^2\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ u_1^{n-1} & u_2^{n-1} & \cdots & u_n^{n-1}\end{bmatrix}$$

的逆为

$$\begin{bmatrix} l_1^{(0)} & l_1^{(1)} & \cdots & l_1^{(n-1)} \\ l_2^{(0)} & l_2^{(0)} & \cdots & l_2^{(n-1)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ l_n^{(0)} & l_n^{(1)} & \cdots & l_n^{(n-1)} \end{bmatrix}$$

记

$$e^{-\frac{\tau_k}{M}} = u_k$$

$$sB_k\boldsymbol{T}(s\tau_k)x_0^{(i)}e^{-\omega s\tau_k} = y_k,\ k = 1,2,\cdots,n$$

$$\boldsymbol{R}\left(\omega + \frac{1 + r/M}{s};\boldsymbol{L}\right)x_0^{(i)} = f_r,\ i = 1,2,\cdots,n$$

则式(2.39)可写成

$$\sum_{k=1}^{n} y_k u_k^r = f_r,\ r = 0,1,\cdots,n-1$$

即

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ u_1 & u_2 & \cdots & u_n \\ u_1^2 & u_2^2 & \cdots & u_n^2 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ u_1^{n-1} & u_2^{n-1} & \cdots & u_n^{n-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_0 \\ f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_{n-1} \end{bmatrix} \tag{2.41}$$

上述方程的解为

$$y_k = \sum_{r=0}^{n-1} l_k^{(r)} f_r,\ k = 1,2,\cdots,n \tag{2.42}$$

即得

$$sB_k\boldsymbol{T}(s\tau_k)x_0^{(i)}e^{-\omega s\tau_k} = \sum_{r=0}^{n-1} l_k^{(r)}\boldsymbol{R}\left(\omega + \frac{1 + r/M}{s};\boldsymbol{L}\right)x_0^{(i)},$$

$$k = 1,2,\cdots,n \tag{2.43}$$

要求微分方程初值问题式(2.13)的解，只需在 $t = s\tau_1$ 时的近似解，即

$$\boldsymbol{T}(t)x_0^{(i)} = \boldsymbol{T}(s\tau_1)x_0^{(i)} = \frac{e^{\omega s\tau_1}}{sB_1}\sum_{r=0}^{n-1} l_1^{(r)}\boldsymbol{R}\left(\omega + \frac{1 + r/M}{s};\boldsymbol{L}\right)x_0^{(i)},$$

$$i = 1,2,\cdots,n \tag{2.44}$$

这样可得到 $t = h = s\tau_1$ 时的方程组的近似解 $x_1^{(i)} = \boldsymbol{T}(t)x_0^{(i)}$，$i = 1,2,\cdots,n$，即得到 $\boldsymbol{x}_1 = (x_1^{(1)},x_1^{(2)},\cdots,x_1^{(n)})^{\mathrm{T}}$。如此迭代，当 $t = kh = ks\tau_1$ 时，方程组的近似解为 $\boldsymbol{x}_k = (x_k^{(1)},x_k^{(2)},\cdots,x_k^{(n)})^{\mathrm{T}}$，$k = 1,2,\cdots$，其中

$$x_k^{(i)} = \boldsymbol{T}(s\tau_1)x_{k-1}^{(i)} = \frac{\mathrm{e}^{\omega s\tau_1}}{sB_1}\sum_{r=0}^{n-1} l_1^{(r)}\boldsymbol{R}\left(\omega + \frac{1+r/M}{s};\boldsymbol{L}\right)x_{k-1}^{(i)},\quad i = 1,2,\cdots,n \tag{2.45}$$

由此可见，选择了求积公式后，τ_1 及 B_1 就已确定，当 M 取定时，$l_1^{(r)}(r = 0,\ 1,\ \cdots,\ n-1)$ 是不变的，每次迭代只须计算 $\boldsymbol{R}\left(\omega + \frac{1+r/M}{s};\boldsymbol{L}\right)\boldsymbol{x}_{k-1}$ 即可。

2.4.3 算例

下面的计算中均取 $M = 100$，$s = 0.02$，$\omega = -4$，式(2.39)中取 $m = 3$，这样所得的方法是二阶的。

【例 2.3】 求解例 2.1 中的非线性周期系统响应问题。图 2.9 和图 2.10 显示了用本节数值方法计算结果与精确解比较所得误差，与例 2.1 的计算结果相同。

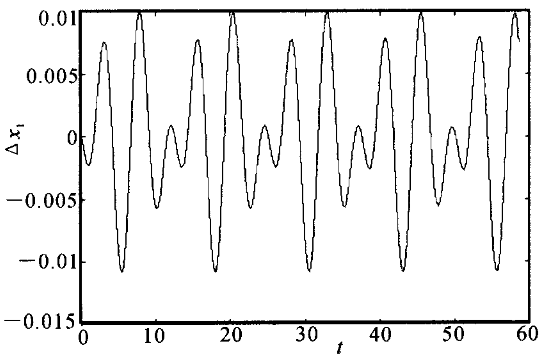


图 2.9 变量 x_1 的误差

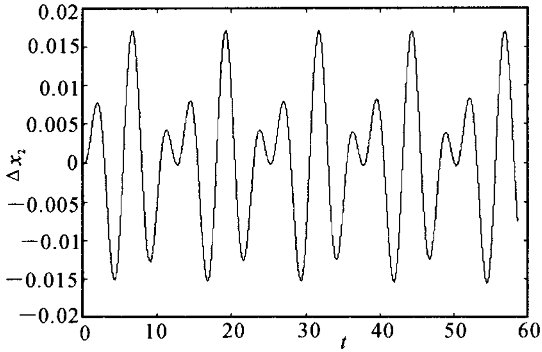


图 2.10　变量 x_2 的误差

【例 2.4】　考虑如下常微分方程初值问题：

$$\ddot{x} = -(\dot{x})^2 - x + \ln t,\ x(1) = 0,\ \dot{x}(1) = 1$$

它可以转化为如下一阶微分方程组的形式

$$\begin{cases} \dot{x}_1 = x_2, & x_1(1) = 0 \\ \dot{x}_2 = -x_1 - x_2^2 + \ln t, & x_2(1) = 1 \end{cases}$$

那么，前述数值方法便可应用。图 2.11 及图 2.12 显示了前述数值方法计算结果与精确解比较所得误差的变化情况。

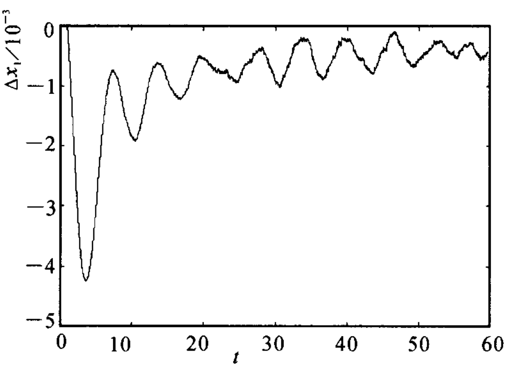


图 2.11　变量 x_1 的误差

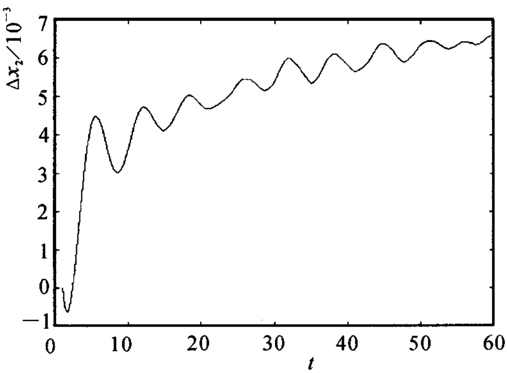


图 2.12 变量 x_2 的误差

2.5 本章小结

本章给出了求解常微分方程(组)的李级数方法,可用于对动力学系统进行理论分析和数值研究,同时具体给出了构造任意精度要求的数值计算方法。对于线性齐次常微分方程(组)$\dot{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{B}\boldsymbol{x}$,其中,$\boldsymbol{B}$ 是 $n \times n$ 定常系数矩阵,由李级数解法可得到其精确解 $\boldsymbol{x} = \mathrm{e}^{\boldsymbol{B}t}\boldsymbol{x}_0$。可见,它是一元常微分方程幂级数解法在 n 维向量空间的推广,其优点在于理论简单且可构造高精度算法。对于复杂问题可以应用分裂合成的办法。另一方面把动力学系统微分方程(组)用微分算子的形式表示之后,其解算子可由它的无穷小生成元(微分算子)的预解式取 Laplace 逆变换得到。而且微分算子的预解式的逆 Laplace 变换形式上是一个关于时间 t 的多项式,这样就再次得到了李级数方法。李级数方法不仅恢复了它在数值计算中应有的地位,而且随着计算机符号推导语言的普及应用,它必将成为解决实际非线性问题的强有力的工具。应当指出,由后面第五章可见,对于自治系统李级数方法是保群算法。最后给出的基于 Laplace 数

值反演的积分方法也是非常有效的，而且它数值稳定。

参考文献

1 李继彬，赵晓华，刘正荣. 广义哈密顿理论及其应用. 北京：科学出版社，1999

2 钱伟长. 微分方程的理论及其解法. 北京：国防工业出版社，1992

3 Arnold V I. Mathematical method of classical-mechanics. 2nd ed. New York: Springer-Verlag, 1989

4 潘祖梁. 非线性问题的数学方法及其应用. 杭州：浙江大学出版社，1998

5 宋文淼. 矢量偏微分算子. 北京：科学出版社，1999

6 Pazy A. Semigroups of Linear Operators and Applications to Partial Differential Equations. New York: Springer-Verlag, 1983

7 胡锡恒. 实用拉普拉斯变换和 Z 变换手册. 北京：电子工业出版社，1988

8 熊大国. 积分变换. 北京：北京理工大学出版社，1990

9 戴煜. Laplace 变换的代数数值反演方法. 数值计算与计算机应用，2001，4：281～286

10 Cunha C, Viloche F. An iterative method for the numerical inversion of laplace transforms. Math Comp, 1995, 64(211): 1193～1198

11 Longman I M. Best rational function approximation for laplace transform inversion. SIAM J. Math. Anal., 1974, 5(4): 574～580

12 项武义，侯自信，孟道骥. 李群讲义. 北京：北京大学出版社，1992

13 McLachlan R I. On the numerical integrationof ordinary differential equations by symmetric composition methods. SIAM J. Sci. Comput., 1995, 16: 151～168

14 蔡志勤，顾元宪，钟万勰. 一类非线性周期系统响应的精细积分法. 力学季刊，2000，21(2)：145～148

第三章 广义 Hamilton 系统的保结构算法

3.1 引 言

Hamilton 系统的动力学研究长期以来一直是力学界的重要课题。Hamilton 力学的观点有效地解决了一系列不能用其他方法解决的问题，显示了其重要的理论价值。然而，经典的 Hamilton 系统的相空间只能是偶数维的，它不能用来研究相空间是奇数维或无限维的力学系统，例如，描述自由刚体定点转动的 Euler 方程，其相空间就是三维的。经典的辛流形上的 Hamilton 系统是用正则 Poisson 括号来表示的，作为一种推广，可以用广义 Poisson 括号去直接定义广义 Hamilton 系统。广义 Hamilton 系统可以是任意有限维或无限维的，同时又保持了经典 Hamilton 系统的大部分良好性质，因此它可以描述更多的动力学问题，具有更大的普遍性，在刚体动力学、随机振动、天体力学、飞行器动力学、等离子体动力学、磁流体动力学、机器人动力学等方面有重要的应用。

辛流形是研究 Hamilton 系统的恰当几何结构[1~3]，当结构矩阵奇异时，Poisson 流形作为辛流形的推广为广义 Hamilton 系统提供了一个更好的几何框架。Poisson 流形上的（有限维）广义 Hamilton 系统，作为传统的辛流形上的 Hamilton 系统的推广，具有广泛的应用前景，因为它可以描述比传统（偶数维）Hamilton 系统更广泛的数学、力学及其他学科中出现的数学模型的运动。广义 Hamilton 系统微分方程的真解是由初始条件到当前状态的一个

典则变换[3]。而多数高阶积分方法不具典则性，易导致伪阻尼或人为激励，甚至长时间迭代后会导致错误的结果。因此有必要研究保持其真解典则性的数值方法。近年来，在数值求解广义 Hamilton 系统微分方程时，人们日益强调其定性的性质[4~5]。这有两方面的原因：一是功能日益强大的计算机使比较复杂的算法得以实现；二是人们发现数值积分能保持常微分方程的某些定性特征。在 Hamilton 体系下，保结构的辛算法已得到广泛的研究[6~10]，Forest 和 Ruth[11]，Forest[12] 及 Yoshida[13] 采用对称合成的办法，方便地构造了二阶、四阶及更高阶的辛积分。上述积分方法均限于无耗散的 Hamilton 系统。然而，耗散广泛存在于各种动力学系统中，对带耗散的动力学系统的研究近年来已引起学术界的广泛关注。程代展、卢强[14] 给出了带耗散的广义 Hamilton 系统的模型及应用方法；朱位秋等[15] 对随机的广义 Hamilton 系统进行了广泛的研究，并取得许多重要成果。但目前还有许多问题值得进一步探索。在上述工作的基础上，本章将在 Poisson 流形上给出构造广义 Hamilton 系统保持其真解典则性的 $m(m \geqslant 1)$ 阶显式积分格式的方法。对于带耗散的广义 Hamilton 系统，以不同的方法分别对待自治系统与非自治系统，用分裂合成的办法求解自治系统；而另外基于经典的 Magnus 级数方法和 Fer 展开式等李群积分思想，研究非自治系统的求解问题，给出耗散广义 Hamilton 系统的保持其广义伪 Poisson 括号的显式积分算法。

上述算法均属于李群方法[16]。此外，其他几何积分法也普遍受到学术界的关注，例如，保持相空间体积的积分法[17]，保持第一积分的积分法[18~20,23]，离散梯度法[21,22]，等等。文献[21] 的几何积分法，是把所求解的常微分方程化为“线性梯度形式”，再用离散梯度的方法求解，其结果保持系统的第一积分和 Lyapunov 函数不变。文献[14] 为广义 Hamilton 控制系统提供了一个几何框架，建立了广义 Hamilton 控制系统的模型形式，直接离散其 Hamilton

函数的梯度来构造数值解法是很自然的。本章用离散梯度方法研究广义 Hamilton 方程的数值解法，并进一步研究广义 Hamilton 控制系统，给出广义 Hamilton(控制) 系统的保持其 Hamilton 函数性质特征不变的数值积分方法。

3.2 Poisson 流形上的广义 Hamilton 系统的数值解法

3.2.1 Poisson 流形及广义 Hamilton 系统的基本理论

定义 3.1 设 M 为 n 维的光滑流形，M 上的广义 Poisson 括号 $\{,\}$ 是一个 $C^\infty(M)\times C^\infty(M)\rightarrow C^\infty(M)$ 的光滑映射，对任意 F，$G\in C^\infty(M)$，满足：

(1) 双线性：

$$\{aF+bG,K\}=a\{F,K\}+b\{G,K\} \tag{3.1}$$

(2) 反对称性：

$$\{F,G\}=-\{G,F\} \tag{3.2}$$

(3) Leibniz 法则：

$$\{F\cdot G,K\}=F\cdot\{G,K\}+G\cdot\{F,K\} \tag{3.3}$$

(4) Jacobi 恒等式：

$$\{F,\{G,K\}\}+\{G,\{K,F\}\}+\{K,\{F,G\}\}=0 \tag{3.4}$$

具有广义 Poisson 括号结构的流形 M，称为 Poisson 流形，记为$(M,\{,\})$，简记为 M。

设 Poisson 流形的局部坐标为$(x_1,x_2,\cdots,x_n)$，则广义 Poisson 括号结构可以由它在坐标函数上的作用而确定。

定义 3.2 广义 Poisson 括号$\{,\}$的结构矩阵 $\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x})$ 是一个 $n\times n$ 阶反对称矩阵，其元素由 $J_{ij}(\boldsymbol{x})=\{x_i,x_j\}$ 定义，称为结构元素。

利用广义 Poisson 括号的 Leibniz 性质，对 $C^\infty(M)$ 中用局部坐

标 $\boldsymbol{x}$ 表示的函数 F,G,有

$$\{F,G\} = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} J_{ij}(\boldsymbol{x}) \frac{\partial F}{\partial x_i}\frac{\partial G}{\partial x_j} \tag{3.5}$$

命题3.1　对于定义在开子集 $M \subset \mathbf{R}^n$ 上 $n\times n$ 函数矩阵 $\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x})$ 是 M 上的一个广义 Poisson 括号的结构矩阵的充分必要条件是 $\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x})$ 是反对称的且满足下列 Jacobi 恒等式:

$$\sum_{l=1}^{n}\left[J_{il}(\boldsymbol{x})\frac{\partial J_{jk}(\boldsymbol{x})}{\partial x_l} + J_{jl}(\boldsymbol{x})\frac{\partial J_{ki}(\boldsymbol{x})}{\partial x_l} + J_{kl}(\boldsymbol{x})\frac{\partial J_{ij}(\boldsymbol{x})}{\partial x_l}\right] = 0,$$

$$i,j,k = 1,2,\cdots,n \tag{3.6}$$

命题3.2　若变换 $\boldsymbol{x}\to\boldsymbol{y}=\varphi(\boldsymbol{x})$ 是一个微分同胚,则它把 $\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x})$ 变为 $\tilde{\boldsymbol{J}}(\boldsymbol{y})$,后者仍然是广义 Poisson 括号的结构矩阵,且有关系

$$\tilde{J}_{\rho\sigma}(\boldsymbol{y}) = \sum_{i,j=1}^{n} \frac{\partial y_\rho}{\partial x_i}\frac{\partial y_\sigma}{\partial x_j} J_{ij}(\varphi^{-1}(\boldsymbol{y})),\ \rho,\sigma = 1,2,\cdots,n \tag{3.7}$$

定义3.3　若上述变换 $\boldsymbol{x}\to\boldsymbol{y}=\varphi(\boldsymbol{x})$ 保持广义 Poisson 括号结构不变,即

$$\tilde{J}_{\rho\sigma}(\boldsymbol{y}) = J_{\rho\sigma}(\boldsymbol{y}),\ \rho,\sigma = 1,2,\cdots,n \tag{3.8}$$

此变换称为广义典则变换。

定义3.4　设$(M,\{,\})$是一个 Poisson 流形,$H:M\to R$ 是 M 上的光滑函数(H 也可以是时间 t 的函数),那么 M 上由 H 确定的广义 Hamilton 向量场 $\boldsymbol{X}_H$ 定义为:对一切 $F\in C^\infty(M)$,有

$$\boldsymbol{L}_{\boldsymbol{X}_H} F = \{F,H\} \tag{3.9}$$

函数 H 称为该向量场的 Hamilton 函数。

定义3.5　广义自治 Hamilton 系统是一个三元组$(M,\{,\},H)$,它的动态表示为 $\dot{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{X}_H$,即

$$\dot{x}_i = \{x_i,H\} = \sum_{j=1}^{n} J_{ij}(\boldsymbol{x})\frac{\partial H}{\partial x_j},\ i = 1,2,\cdots,n \tag{3.10}$$

方程式(3.10)被称为广义 Hamilton 方程。设

$$x_i(t) = \boldsymbol{\Psi}_i(\boldsymbol{x}_0, t),\ \boldsymbol{\Psi}_i(\boldsymbol{x}_0, 0) = x_0^{(i)},\ i = 1, 2, \cdots, n \tag{3.11}$$

是广义 Hamilton 方程式(3.10)的 $t=0$ 时过 $\boldsymbol{x}_0 = (x_0^{(1)}, x_0^{(2)}, \cdots, x_0^{(n)})$ 的解。那么对解的存在域中的任何 t，式(3.11)确定了 M 的一个变换，即

$$\boldsymbol{\Psi}: \boldsymbol{x}_0 \to \boldsymbol{\Psi}(\boldsymbol{x}_0, t) \equiv \boldsymbol{x} \tag{3.12}$$

可以证明该变换是一个广义典则变换[3]，即

$$\sum_{i,j=1}^{n} J_{ij}(\boldsymbol{x}_0) \frac{\partial \boldsymbol{\Psi}_\rho(\boldsymbol{x}_0, t)}{\partial x_0^{(i)}} \frac{\partial \boldsymbol{\Psi}_\sigma(\boldsymbol{x}_0, t)}{\partial x_0^{(j)}} = J_{\rho\sigma}(\boldsymbol{x}) \tag{3.13}$$

对于自治的广义 Hamilton 系统，上述典则变换式(3.12)可以显式表示为[3]

$$\boldsymbol{\Psi}_i(\boldsymbol{x}_0, t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} A_n^i(\boldsymbol{x}_0),\ i = 1, 2, \cdots, n \tag{3.14}$$

$$A_0^i(\boldsymbol{x}_0) = x_0^{(i)},\ A_{n+1}^i(\boldsymbol{x}_0) = \{A_n^i(\boldsymbol{x}_0), H(\boldsymbol{x}_0)\} \tag{3.15}$$

定义算子如下：

$$\boldsymbol{L}(\boldsymbol{x}_0) = -\sum_{i,j=1}^{n} J_{ij}(\boldsymbol{x}_0) \frac{\partial H}{\partial x_0^{(i)}} \frac{\partial}{\partial x_0^{(j)}} \tag{3.16}$$

那么，可以将 $\boldsymbol{\Psi}$ 写成更紧凑的形式，即

$$\boldsymbol{\Psi}_i(\boldsymbol{x}_0, t) = \mathrm{e}^{t\boldsymbol{L}(\boldsymbol{x}_0)} x_0^{(i)},\ i = 1, 2, \cdots, n \tag{3.17}$$

3.2.2 广义 Hamilton 系统的保结构算法

下面根据式(3.17)来构造数值迭代算法。记

$$\boldsymbol{L}(\boldsymbol{x}_0) = -\sum_{i,j=1}^{n} J_{ij}(\boldsymbol{x}_0) \frac{\partial H}{\partial x_0^{(i)}} \frac{\partial}{\partial x_0^{(j)}} = f_1(\boldsymbol{x}_0) \frac{\partial}{\partial x_0^{(1)}} + f_2(\boldsymbol{x}_0) \frac{\partial}{\partial x_0^{(2)}} + \cdots + f_n(\boldsymbol{x}_0) \frac{\partial}{\partial x_0^{(n)}} \tag{3.18}$$

那么

$$\boldsymbol{L}(\boldsymbol{x}_0) x_0^{(i)} = f_i(\boldsymbol{x}_0),\ i = 1, 2, \cdots, n \tag{3.19}$$

简记

$$\left.\begin{aligned} L_i^1 &= L_i^1(\boldsymbol{x}_0) = \boldsymbol{L}(\boldsymbol{x}_0)x_0^{(i)} \\ L_i^k &= L_i^k(\boldsymbol{x}_0) = \boldsymbol{L}^k(\boldsymbol{x}_0)x_0^{(i)},\ k = 1,2,\cdots \end{aligned}\right\} \tag{3.20}$$

那么，有

$$\left.\begin{aligned} L_i^1 &= \boldsymbol{L}x_0^{(i)} = \\ &(f_1,f_2,\cdots,f_n)\left(\frac{\partial x_0^{(i)}}{\partial x_0^{(1)}},\cdots,\frac{\partial x_0^{(i)}}{\partial x_0^{(i)}},\cdots,\frac{\partial x_0^{(i)}}{\partial x_0^{(n)}}\right)^{\mathrm{T}} = f_i \\ L_i^2 &= \boldsymbol{L}^2x_0^{(i)} = \boldsymbol{L}f_i = \\ &(f_1,f_2,\cdots,f_n)\left(\frac{\partial f_i}{\partial x_0^{(1)}},\frac{\partial f_i}{\partial x_0^{(2)}},\cdots,\frac{\partial f_i}{\partial x_0^{(n)}}\right)^{\mathrm{T}} \\ L_i^m &= \boldsymbol{L}^m x_0^{(i)} = \boldsymbol{L}^{m-1}f_i = \\ &C_{m-2}^0(L_1^{m-1},L_2^{m-1},\cdots,L_n^{m-1})\left(\frac{\partial f_i}{\partial x_0^{(1)}},\frac{\partial f_i}{\partial x_0^{(2)}},\cdots,\frac{\partial f_i}{\partial x_0^{(n)}}\right)^{\mathrm{T}} + \\ &C_{m-2}^1(L_1^{m-2},L_2^{m-2},\cdots,L_n^{m-2})\times \\ &\left(\boldsymbol{L}\frac{\partial f_i}{\partial x_0^{(1)}},\boldsymbol{L}\frac{\partial f_i}{\partial x_0^{(2)}},\cdots,\boldsymbol{L}\frac{\partial f_i}{\partial x_0^{(n)}}\right)^{\mathrm{T}} + \cdots + \\ &C_{m-2}^{m-2}(f_1,f_2,\cdots,f_n)\times \\ &\left(\boldsymbol{L}^{m-2}\frac{\partial f_i}{\partial x_0^{(1)}},\boldsymbol{L}^{m-2}\frac{\partial f_i}{\partial x_0^{(2)}},\cdots,\boldsymbol{L}^{m-2}\frac{\partial f_i}{\partial x_0^{(n)}}\right)^{\mathrm{T}} \end{aligned}\right\} \tag{3.21}$$

式中，$i = 1,2,\cdots,n$，而 $m = 3,4,5\cdots$。

由上可见，要计算 L_i^m，只需在 L_i^{m-1} 及 $\boldsymbol{L}^{m-3}\dfrac{\partial f_i}{\partial x_j}$，$m = 3,4,5,\cdots$，$\left(\boldsymbol{L}^0\dfrac{\partial f_i}{\partial x_j} = \dfrac{\partial f_i}{\partial x_j}\right)$的基础上进一步计算 $\boldsymbol{L}^{m-2}\dfrac{\partial f_i}{\partial x_j}$，$j = 1,2,\cdots,n$；$i = 1,2,\cdots,n$。如此，可以构造 $m(m \geqslant 1)$ 阶迭代格式。设步长为 h，记 $x_k^{(i)}$ 为 $\boldsymbol{x}$ 的第 i 个分量的第 k 次迭代值，那么，$x_1^{(i)} = \Psi_i(\boldsymbol{x}_0, h) = x_0^{(i)} + hL_i^1(\boldsymbol{x}_0) + \cdots + \dfrac{h^m}{m!}L_i^m(\boldsymbol{x}_0)$，$i = 1,2,\cdots,n$，它是第一次

迭代值，得到 $\boldsymbol{x}_1=(x_1^{(1)},x_1^{(2)},\cdots,x_1^{(n)})^{\mathrm{T}}$，第 k 次迭代值为 $\boldsymbol{x}_k=(x_k^{(1)},\cdots,x_k^{(n)})^{\mathrm{T}}$，其中，$x_k^{(i)}=\Psi_i(\boldsymbol{x}_{k-1},h)$，也就是

$$x_k^{(i)}=\Psi_i(\boldsymbol{x}_{k-1},h)=x_{k-1}^{(i)}+hL_i^1(\boldsymbol{x}_{k-1})+\cdots+\frac{h^m}{m!}L_i^m(\boldsymbol{x}_{k-1}),$$
$$i=1,2,\cdots,n;\ k=1,2,\cdots \tag{3.22}$$

如此可得 m 阶精度的数值解。

事实上，本节的保结构算法是第二章中李级数解法在 Poisson 流形上广义 Hamilton 系统的一个特例。

对于非自治广义 Hamilton 系统，有

$$\dot{\boldsymbol{x}}=\{\boldsymbol{x},H(\boldsymbol{x},t)\} \tag{3.23}$$

根据文献[5]的方法可以将它做如下处理：

$$\left.\begin{aligned}&\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{x}}{\mathrm{d}\tau}=\{\boldsymbol{x},H(\boldsymbol{x},t)+p_t\}\\&\frac{\mathrm{d}t}{\mathrm{d}\tau}=\{t,H+p_t\}=1\\&\frac{\mathrm{d}p_t}{\mathrm{d}\tau}=\{p_t,H+p_t\}=\frac{-\partial H}{\partial t}\end{aligned}\right\} \tag{3.24}$$

相空间变量拓广到 $\boldsymbol{w}=(\boldsymbol{x},t,p_t)^{\mathrm{T}}$，这时新的时间变量为 τ。

3.2.3 广义 Hamilton 控制系统中算法的应用

广义 Hamilton 控制系统为

$$\left.\begin{aligned}&\dot{\boldsymbol{x}}=\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x})\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{x}}(\boldsymbol{x})+\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{u}\\&\boldsymbol{y}=\boldsymbol{g}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x})\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{x}}(\boldsymbol{x})\end{aligned}\right\} \tag{3.25}$$

又可写为
$$\begin{bmatrix}\dot{\boldsymbol{x}}\\\dot{\boldsymbol{\eta}}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x}) & -\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x})\\\boldsymbol{g}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x}) & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\dfrac{\partial H_a}{\partial \boldsymbol{x}}\\\dfrac{\partial H_a}{\partial \boldsymbol{\eta}}\end{bmatrix}$$

式中，$H_a(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\eta})=H(\boldsymbol{x})+H_s(\boldsymbol{\eta})$，$H_s(\boldsymbol{\eta})=-\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\eta}$，$\dot{\boldsymbol{\eta}}=\boldsymbol{y}$，则前面

所给数值方法同样适用。

3.2.4　算例

【例 3.1】　求解如下 Hamilton 系统微分方程：

$$\begin{bmatrix}\dot{q}_1\\ \dot{q}_2\\ \dot{p}_1\\ \dot{p}_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0 & 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 1\\ -1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & -1 & 0 & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\dfrac{\partial H}{\partial q_1}\\ \dfrac{\partial H}{\partial q_2}\\ \dfrac{\partial H}{\partial p_1}\\ \dfrac{\partial H}{\partial p_2}\end{bmatrix},\quad \begin{bmatrix}q_1(0)\\ q_2(0)\\ p_1(0)\\ p_2(0)\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\dfrac{1}{4}\\ 1.9\sqrt{2}\\ \dfrac{\sqrt{3}}{4}\\ -1.9\sqrt{2}\end{bmatrix}$$

式中，$H=\dfrac{p_1^2+q_1^2}{p_2^2+q_2^2}$。取时间步长 $h=0.1$，采用二阶算法进行计算。图 3.1 给出了迭代 10 000 步 Hamilton 函数的误差变化，图 3.2 和图 3.3 分别给出了对偶变量 q_1，p_1 及 q_2，p_2 的误差。

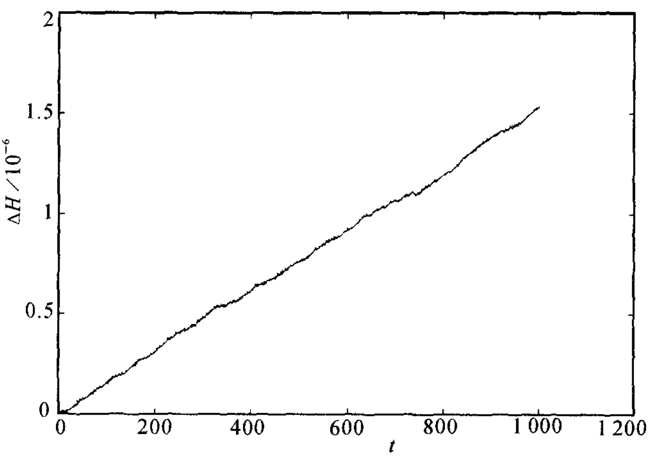


图 3.1　Hamilton 函数的误差

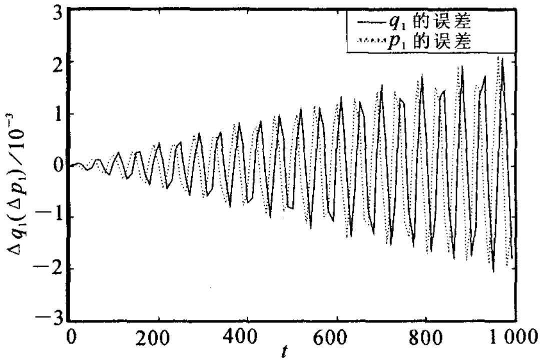


图 3.2 变量 q_1, p_1 的误差

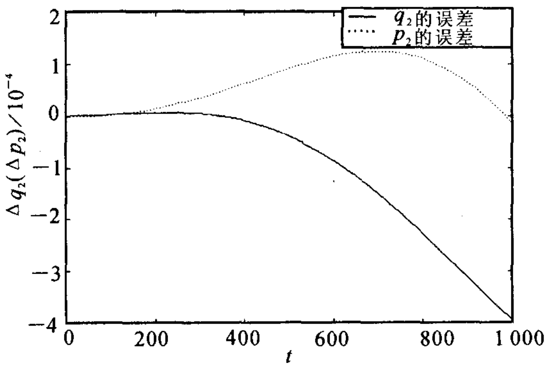


图 3.3 变量 q_2, p_2 的误差

3.3 Hamilton 系统的辛算法

3.3.1 Hamilton 系统

如果广义 Hamilton 系统式(3.10)中的结构矩阵 $\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x})$ 为标准的辛矩阵 $\boldsymbol{J}$，则广义 Hamilton 系统式(3.10)就是一个 Hamilton 系

统。其中，辛矩阵 $\boldsymbol{J}=\begin{bmatrix}0 & \boldsymbol{I}\\ -\boldsymbol{I} & 0\end{bmatrix}$，$\boldsymbol{I}$ 是 n 维单位矩阵。Hamilton 系统对应有标准的 Poisson 括号{,}（本节中相同符号均指 Poisson 括号），即

$$\{\boldsymbol{F},\boldsymbol{G}\}=\boldsymbol{F}_q\boldsymbol{G}_q^{\mathrm{T}}-\boldsymbol{F}_p\boldsymbol{G}_q^{\mathrm{T}} \tag{3.26}$$

式中，$\boldsymbol{F}$ 和 $\boldsymbol{G}$ 是关于 $\boldsymbol{q}$ 和 $\boldsymbol{p}$ 的光滑的向量函数，即 $\boldsymbol{q},\boldsymbol{p}\in\boldsymbol{R}^n$，$\boldsymbol{F}:\boldsymbol{R}^{2n}\rightarrow\boldsymbol{R}^l$，$\boldsymbol{G}:\boldsymbol{R}^{2n}\rightarrow\boldsymbol{R}^k$，$k,l\geqslant 1$。那么，Hamilton 系统有如下方程形式，即

$$\left.\begin{aligned}\dot{\boldsymbol{q}}&=\frac{\partial H(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p})}{\partial\boldsymbol{p}}\\ \dot{\boldsymbol{p}}&=-\frac{\partial H(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p})}{\partial\boldsymbol{q}}\end{aligned}\right\} \tag{3.27}$$

式中，$H:\boldsymbol{R}^{2n}\rightarrow\boldsymbol{R}$。记 $\boldsymbol{x}=(\boldsymbol{q}^{\mathrm{T}},\boldsymbol{p}^{\mathrm{T}})^{\mathrm{T}}$，则 Hamilton 系统式(3.27)又可以写成

$$\dot{\boldsymbol{x}}=\{\boldsymbol{x},H\} \tag{3.28}$$

而任意向量函数 $\boldsymbol{f}:\boldsymbol{R}^{2n}\rightarrow\boldsymbol{R}^m$，$m\geqslant 1$ 随时间的变化可以表示为

$$\dot{\boldsymbol{f}}=\{\boldsymbol{f},H\} \tag{3.29}$$

进一步引入微分算子 $\boldsymbol{d}_G$，$G:\boldsymbol{R}^{2n}\rightarrow\boldsymbol{R}$，有

$$\boldsymbol{d}_G\boldsymbol{F}=\{\boldsymbol{F},G\} \tag{3.30}$$

那么，又可以把式(3.28)写为如下形式：

$$\dot{\boldsymbol{x}}=\boldsymbol{d}_H\boldsymbol{x} \tag{3.31}$$

它的解可以形式地写为

$$\boldsymbol{x}(t)=\exp(t\boldsymbol{d}_H)\boldsymbol{x}_0 \tag{3.32}$$

Hamilton 矢量场式(3.27)的一个非常重要的性质，即是对于足够小的 t，$\exp(t\boldsymbol{d}_H)$ 是一个典则映射，即 $\exp(t\boldsymbol{d}_H)$ 应保持 Hamilton 系统的辛结构，也就是说它是一个辛映射，见如下定义。

定义 3.6　如果一个线性映射 $\boldsymbol{A}:\boldsymbol{R}^{2n}\rightarrow\boldsymbol{R}^{2n}$ 满足 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{J}\boldsymbol{A}=\boldsymbol{J}$，则称它为辛映射。

定义 3.7 一个可微映射 $\boldsymbol{g}:\boldsymbol{U}\rightarrow\boldsymbol{R}^{2n}$（$\boldsymbol{U}\in\boldsymbol{R}^{2n}$ 是一开集），如果它的 Jacobi 矩阵 $\boldsymbol{g}'(\boldsymbol{p},\boldsymbol{q})$ 处处是辛的，即满足 $\boldsymbol{g}'(\boldsymbol{p},\boldsymbol{q})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{J}\boldsymbol{g}'(\boldsymbol{p},\boldsymbol{q})=\boldsymbol{J}$，则称该映射为辛映射。

3.3.2 Hamilton 系统的辛算法

定理 3.1 设 $b_i,a_{ij},i,j=1,2,\cdots,s$，是实数，$c_i=\sum_{j=1}^{s}a_{ij}$，则按如下定义 s 级 Runge-Kutta 方法：

$$\left.\begin{aligned}\boldsymbol{k}_i&=\boldsymbol{f}\Big(t_0+ch,\ \boldsymbol{x}_0+h\sum_{j=1}^{s}a_{ij}\boldsymbol{k}_j\Big)\\ \boldsymbol{x}_1&=\boldsymbol{x}_0+h\sum_{i=1}^{s}b_i\boldsymbol{k}_i\end{aligned}\right\}\tag{3.33}$$

如果其系数满足条件

$$b_ia_{ij}+b_ja_{ji}=b_ib_j,\quad i,j=1,2,\cdots,s$$

则它是一类辛格式。

定理 3.2 所谓的辛 Euler 方法为

$$\left.\begin{aligned}\boldsymbol{p}_{n+1}&=\boldsymbol{p}_n-h\frac{\partial H(\boldsymbol{q}_n,\boldsymbol{p}_{n+1})}{\partial\boldsymbol{q}}\\ \boldsymbol{q}_{n+1}&=\boldsymbol{q}_n+h\frac{\partial H(\boldsymbol{q}_n,\boldsymbol{p}_{n+1})}{\partial\boldsymbol{p}}\end{aligned}\right\}\tag{3.34}$$

它是一阶辛格式。

定理 3.3 隐式中点公式为

$$\boldsymbol{x}_{n+1}=\boldsymbol{x}_n+h\boldsymbol{J}^{-1}\nabla H((\boldsymbol{x}_{n+1}+\boldsymbol{x}_n)/2)\tag{3.35}$$

它是二阶辛格式。

Hairer 证明了 Hamilton 系统的辛积分格式具有后延误差的性质，即对于步长为 h 单步辛格式，即

$$\boldsymbol{x}_{n+1}=\boldsymbol{\Psi}_h\boldsymbol{x}_n\tag{3.36}$$

总存在一扰动 Hamilton 函数，它可以渐进展开为级数形式，使得

式(3.36)中的 $\boldsymbol{\Psi}_h$ 可以表示为

$$\boldsymbol{\Psi}_h = \exp(h\boldsymbol{d}_{\widetilde{H}}) \tag{3.37}$$

也就是说，映射 $\boldsymbol{\Psi}_h$ 可以看做该扰动 Hamilton 函数生成的 Hamilton 矢量场，即

$$\dot{\boldsymbol{x}} = \{\boldsymbol{x}, \widetilde{H}\} \tag{3.38}$$

的时间 h 流。这个问题后面还会讲到，这里不多解释。

Yoshida 首先提出了 Hamilton 系统式(3.27)的高阶算法可通过又诸如隐式中点格式等二阶对称辛方法来合成。为此，先介绍一个算法的共轭及合成方法的概念，后面会发现它们在算法的构造中非常重要。

3.3.3　共轭算法

我们知道，关于时间对称的数值方法具有许多很好的性质，共轭方法的概念对于理解和掌握对称性非常重要。对于自治系统，即

$$\dot{\boldsymbol{y}} = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{y}),\quad \boldsymbol{y}(t_0) = \boldsymbol{y}_0 \tag{3.39}$$

它的流 $\boldsymbol{\varphi}_h$ 应满足对称性质 $\boldsymbol{\varphi}_{-t}^{-1} = \boldsymbol{\varphi}_t$。但是通常一个单步数值方法 $\boldsymbol{\Phi}_h$ 不具备该性质。

定义 3.8　算法 $\boldsymbol{\Phi}_h$ 的共轭算法 $\boldsymbol{\Phi}_h^*$ 是一个新的算法，即

$$\boldsymbol{\Phi}_h^* := \boldsymbol{\Phi}_{-h}^{-1} \tag{3.40}$$

也就是说，$\boldsymbol{y}_1 = \boldsymbol{\Phi}_h^*(\boldsymbol{y}_0)$ 隐含 $\boldsymbol{y}_0 = \boldsymbol{\Phi}_{-h}(\boldsymbol{y}_1)$。当然，如果 $\boldsymbol{\Phi}_h^* := \boldsymbol{\Phi}_h$，则算法一定是关于时间对称的。例如，隐式中点公式是对称格式；而隐式 Euler 方法的共轭方法是显式 Euler 方法。

共轭方法有如下性质：

(1) $(\boldsymbol{\Phi}_h^*)^* = \boldsymbol{\Phi}_h$　(3.41)

(2) $(\boldsymbol{\Phi}_h \circ \boldsymbol{\Psi}_h)^* = \boldsymbol{\Psi}_h^* \circ \boldsymbol{\Phi}_h^*$　(3.42)

定理 3.4　设 $\boldsymbol{\varphi}_h$ 是式(3.39)的精确解，而 $\boldsymbol{\Phi}_h$ 是它的一个 p 阶数值方法，满足

$$\boldsymbol{\Phi}_h(\boldsymbol{y}_0) = \boldsymbol{\varphi}_h(\boldsymbol{y}_0) + C(\boldsymbol{y}_0)h^{p+1} + O(h^{p+2}) \tag{3.43}$$

那么，共轭算法 $\boldsymbol{\Phi}_h^*$ 同样是一 p 阶方法，且有如下估计：

$$\boldsymbol{\Phi}_h^*(\boldsymbol{y}_0)=\boldsymbol{\varphi}_h(\boldsymbol{y}_0)+(-1)^pC(\boldsymbol{y}_0)h^{p+1}+O(h^{p+2}) \tag{3.44}$$

如果该方法是对称方法，则它是偶数阶的。

证明　由给定的初始点 $\boldsymbol{y}_0$，计算 $\boldsymbol{\varphi}_h(\boldsymbol{y}_0)$ 及 $\boldsymbol{y}_1=\boldsymbol{\Phi}_h^*(\boldsymbol{y}_0)$，并记 $\boldsymbol{\Phi}_h^*(\boldsymbol{y}_0)$ 的局部误差为 e^*。然后把该误差由 $\boldsymbol{\Phi}_{-h}$ 映射即可返回得到 $\boldsymbol{\Phi}_h$ 的误差 e。而 $-e$ 显然是 $\boldsymbol{\Phi}_{-h}$ 的局部误差。由假设式(3.43)知

$$e=(-1)^pC(\boldsymbol{\varphi}_h(\boldsymbol{y}_0))h^{p+1}+O(h^{p+2}) \tag{3.45}$$

因为 $\boldsymbol{\varphi}_h(\boldsymbol{y}_0)=\boldsymbol{y}_0+O(h)$ 及 $e=(\boldsymbol{I}+O(h))e^*$，所以

$$e^*=(-1)^pC(\boldsymbol{y}_0)h^{p+1}+O(h^{p+2})$$

因此式(3.44)得证。如果算法是对称方法，就有 $\boldsymbol{\Phi}_h^*=\boldsymbol{\Phi}_h$，于是 $C(\boldsymbol{y}_0)=(-1)^pC(\boldsymbol{y}_0)$，$p$ 必然是偶数。

3.3.4　合成算法

由给定的某种单步方法(及其共轭方法)采用不同的步长来合成新的数值方法，可以在保持原计算方法的性质的同时能提高计算精度。具体讲，假设 $\boldsymbol{\Phi}_h$ 是一基本方法，$\gamma_1,\gamma_2,\cdots,\gamma_s$ 是实数，那么，我们称它的不同步长 $\gamma_1h,\gamma_2h,\cdots,\gamma_sh$ 的算法的合成

$$\boldsymbol{\Psi}_h=\boldsymbol{\Phi}_{\gamma_sh}\circ\boldsymbol{\Phi}_{\gamma_{s-1}h}\circ\cdots\circ\boldsymbol{\Phi}_{\gamma_1h} \tag{3.46}$$

为 $\boldsymbol{\Phi}_h$ 的合成方法。

定理 3.5　假设 $\boldsymbol{\Phi}_h$ 是一 p 阶单步方法，如果

$$\begin{aligned}&\gamma_1+\gamma_2+\cdots+\gamma_s=1\\&\gamma_1^{p+1}+\gamma_2^{p+1}+\cdots+\gamma_s^{p+1}=0\end{aligned} \tag{3.47}$$

那么，合成方法式(3.46)至少是 $p+1$ 阶的。

证明　类似于定理 3.5 的证明，不妨设 $s=3$。根据假设，有

$$\boldsymbol{y}_1=\boldsymbol{\Phi}_{\gamma_1h}(\boldsymbol{y}_0)=\boldsymbol{\varphi}_h(\boldsymbol{y}_0)+C(\boldsymbol{y}_0)\gamma_1^{p+1}h^{p+1}+O(h^{p+2})$$

$$\boldsymbol{y}_2=\boldsymbol{\Phi}_{\gamma_2h}(\boldsymbol{y}_0)=\boldsymbol{\varphi}_h(\boldsymbol{y}_1)+C(\boldsymbol{y}_1)\gamma_2^{p+1}h^{p+1}+O(h^{p+2})$$

$$\boldsymbol{y}_3=\boldsymbol{\Phi}_{\gamma_3h}(\boldsymbol{y}_0)=\boldsymbol{\varphi}_h(\boldsymbol{y}_2)+C(\boldsymbol{y}_0)\gamma_3^{p+1}h^{p+1}+O(h^{p+2})$$

记
$$e_i = \boldsymbol{y}_i - \boldsymbol{y}_{i-1},\ i = 1,2,3$$
因为 $\boldsymbol{y}_i = \boldsymbol{y}_0 + O(h)$，且 $\sum \gamma_i = 1$，所以

$$\boldsymbol{\Phi}_h(\boldsymbol{y}_0) - \boldsymbol{\varphi}_h(\boldsymbol{y}_0) = e_1 + e_2 + e_3 = C(\boldsymbol{y}_0)(\gamma_1^{p+1} + \gamma_2^{p+1} + \gamma_3^{p+1})h^{p+1} + O(h^{p+2})$$

根据假设中的第二个条件，上式中 $O(h^{p+1})$ 项为零。

我们还可以用一个算法和它的共轭算法进行合成。一般地可以取如下形式：

$$\boldsymbol{\Psi}_h = \boldsymbol{\Phi}_{\alpha_s h} \circ \boldsymbol{\Phi}^*_{\beta_s h} \circ \cdots \circ \boldsymbol{\Phi}^*_{\beta_2 h} \circ \boldsymbol{\Phi}_{\alpha_1 h} \circ \boldsymbol{\Phi}^*_{\beta_1 h} \tag{3.48}$$

同理可证明式(3.48)要提高一阶精度，应满足如下条件：

$$\left.\begin{array}{l} \beta_1 + \alpha_1 + \beta_2 + \cdots + \beta_s + \alpha_s = 1 \\ (-1)^p\beta_1^{p+1} + \alpha_1^{p+1} + (-1)^p\beta_2^{p+1} + \cdots + \\ \qquad (-1)^p\beta_s^{p+1} + \alpha_s^{p+1} = 0 \end{array}\right\} \tag{3.49}$$

例如，当 $p = s = 1$ 时，取 $\alpha_1 = \beta_1 = \dfrac{1}{2}$，可以用任意一阶方法 $\boldsymbol{\Phi}_h$ 合成一个二阶方法 $\boldsymbol{\Psi}_h$：$\boldsymbol{\Psi}_h = \boldsymbol{\Phi}_{h/2} \circ \boldsymbol{\Phi}^*_{h/2}$。

3.3.5　分裂合成方法

分裂与合成是分不开的，如果一个矢量场可以分裂为两个分别具有精确解的子问题，那么通过合成的办法不难得到它的数值解。对于任意动力学系统 $\dot{\boldsymbol{y}} = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{y})$，假设它可以分裂为

$$\dot{\boldsymbol{y}} = \boldsymbol{f}^{[1]}(\boldsymbol{y}) + \boldsymbol{f}^{[2]}(\boldsymbol{y}) \tag{3.50}$$

如果 $\dot{\boldsymbol{y}} = \boldsymbol{f}^{[i]}(\boldsymbol{y})$ 的精确解分别为 $\boldsymbol{\varphi}_t^{[i]}$，那么，互为共轭的算法 $\boldsymbol{\Phi}_h = \boldsymbol{\varphi}_h^{[1]} \circ \boldsymbol{\varphi}_h^{[2]}$ 及 $\boldsymbol{\Phi}_h^* = \boldsymbol{\varphi}_h^{[2]} \circ \boldsymbol{\varphi}_h^{[1]}$ 分别给出原问题的一个一阶近似解，而 $\boldsymbol{\Psi}_h = \boldsymbol{\Phi}_{h/2} \circ \boldsymbol{\Phi}^*_{h/2} = \boldsymbol{\varphi}_{h/2}^{[1]} \circ \boldsymbol{\varphi}_h^{[2]} \circ \boldsymbol{\varphi}_{h/2}^{[1]}$ 给出一个二阶的对称格式。当然还可以类似于式(3.48)构造高阶近似格式。即通过确定待定系数 $a_1, b_1, a_2, b_2, \cdots, a_m, b_m$（其中 a_1 或者 b_m 是零，也可能两者都是零），使得

$$\boldsymbol{\Psi}_h = \boldsymbol{\varphi}_{b_m h}^{[2]} \circ \boldsymbol{\varphi}_{a_m h}^{[1]} \circ \boldsymbol{\varphi}_{b_{m-1} h}^{[2]} \circ \cdots \circ \boldsymbol{\varphi}_{a_2 h}^{[1]} \circ \boldsymbol{\varphi}_{b_1 h}^{[2]} \circ \boldsymbol{\varphi}_{a_1 h}^{[1]} \tag{3.51}$$

达到高阶精度。

有时，分裂后式(3.50)中只有一个子问题有精确解，而另一子问题只能得到其数值解，不妨设 $\boldsymbol{\varphi}_h^{[1]}$ 是 $\dot{\boldsymbol{y}} = \boldsymbol{f}^{[1]}(\boldsymbol{y})$ 的精确流，$\boldsymbol{\Phi}_h^{[2]}$ 是 $\dot{\boldsymbol{y}} = \boldsymbol{f}^{[2]}(\boldsymbol{y})$ 的一个一阶数值流，那么由 $\boldsymbol{\Phi}_h = \boldsymbol{\varphi}_h^{[1]} \circ \boldsymbol{\Phi}_h^{[2]}$ 及 $\boldsymbol{\Phi}_h^* = \boldsymbol{\Phi}_h^{[2]} \circ \boldsymbol{\varphi}_h^{[1]}$ 作为合成方法式(3.48)的基，构造的合成方法为

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\Psi}_h = \boldsymbol{\varphi}_{\alpha_s h}^{[1]} \circ \boldsymbol{\Phi}_{\alpha_s h}^{[2]} \circ \boldsymbol{\Phi}_{\beta_s h}^{[2]*} \circ \\ \boldsymbol{\varphi}_{(\beta_s+\alpha_{s-1})h}^{[1]} \circ \boldsymbol{\Phi}_{\alpha_{s-1}h}^{[2]} \circ \cdots \circ \boldsymbol{\Phi}_{\beta_1 h}^{[2]*} \circ \boldsymbol{\varphi}_{\beta_1 h}^{[1]}\end{aligned} \tag{3.52}$$

它可以达到高阶计算精度，但不能保持原动力学系统的李群性质。

如果微分方程可以分裂为能精确求解的 N 个部分：

$$\dot{\boldsymbol{y}} = \boldsymbol{f}^{[1]}(\boldsymbol{y}) + \boldsymbol{f}^{[2]}(\boldsymbol{y}) + \cdots + \boldsymbol{f}^{[N]}(\boldsymbol{y}) \tag{3.53}$$

设 $\dot{\boldsymbol{y}} = \boldsymbol{f}^{[i]}(\boldsymbol{y})$ 的流分别为 $\boldsymbol{\varphi}_t^{[i]}$，那么可以推广式(3.51)来构造合成方法 $\boldsymbol{\varphi}_{a_j h}^{[1]}, \boldsymbol{\varphi}_{b_j h}^{[2]}, \boldsymbol{\varphi}_{c_j h}^{[3]}, \cdots$。但是这样很难构造一种最优的合成方法，最简单的也是非常有效的办法是用一阶方法 $\boldsymbol{\Phi}_h = \boldsymbol{\varphi}_h^{[1]} \circ \boldsymbol{\varphi}_h^{[2]} \circ \cdots \circ \boldsymbol{\varphi}_h^{[N]}$ 及其共轭方法根据式(3.48)来构造高阶算法。

3.4 BCH 公式

3.4.1 指数映射的导数及其逆映射

对任意两个矩阵 $\boldsymbol{\Omega}$ 和 $\boldsymbol{A}$，它们的交换子 $[\boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{A}]$ 定义为

$$[\boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{A}] = \boldsymbol{\Omega}\boldsymbol{A} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{\Omega} \tag{3.54}$$

如果 $[\boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{A}] \equiv 0$，则称它们是可交换的，否则为不可交换的。如果固定 $\boldsymbol{\Omega}$，那么由式(3.54)可以定义一个线性算子 $\boldsymbol{A} \to [\boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{A}]$，即

$$\boldsymbol{ad}_{\boldsymbol{\Omega}}(\boldsymbol{A}) = [\boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{A}] \tag{3.55}$$

称为伴随算子。为了计算指数映射的导数，下面首先计算 $\boldsymbol{\Omega}^k$ 的导数。

$$\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\boldsymbol{\Omega}}\boldsymbol{\Omega}^k\right)\boldsymbol{H} = \boldsymbol{H}\boldsymbol{\Omega}^{k-1} + \boldsymbol{\Omega}\boldsymbol{H}\boldsymbol{\Omega}^{k-2} + \cdots + \boldsymbol{\Omega}^{k-1}\boldsymbol{H} \tag{3.56}$$

如果 $\boldsymbol{\Omega}$ 和 $\boldsymbol{H}$ 可交换，那么

$$\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\boldsymbol{\Omega}}\boldsymbol{\Omega}^k\right)\boldsymbol{H} = k\boldsymbol{H}\boldsymbol{\Omega}^{k-1} \tag{3.57}$$

一般情况下，$\boldsymbol{\Omega}$ 和 $\boldsymbol{H}$ 不可交换。为此作如下等价的记号，当 $k=2$ 及 $k=3$ 时，有

$$\boldsymbol{H\Omega} + \boldsymbol{\Omega H} = 2\boldsymbol{H\Omega} + \boldsymbol{ad}_{\boldsymbol{\Omega}}(\boldsymbol{H})$$

$$\boldsymbol{H\Omega}^2 + \boldsymbol{\Omega H\Omega} + \boldsymbol{\Omega}^2\boldsymbol{H} = 3\boldsymbol{H\Omega}^2 + 3(\boldsymbol{ad}_{\boldsymbol{\Omega}}(\boldsymbol{H}))\boldsymbol{\Omega} + \boldsymbol{ad}^2_{\boldsymbol{\Omega}}(\boldsymbol{H})$$

其中，$\boldsymbol{ad}^i_{\boldsymbol{\Omega}}(\boldsymbol{H})$ 是伴随算子的迭代应用，而 $\boldsymbol{ad}^0_{\boldsymbol{\Omega}}(\boldsymbol{H}) = \boldsymbol{H}$。对于 $\boldsymbol{\Omega}^k = \boldsymbol{\Omega}\cdot\boldsymbol{\Omega}^{k-1}$，应用 Leibniz 法则及恒等式 $\boldsymbol{\Omega}(\boldsymbol{ad}^i_{\boldsymbol{\Omega}}(\boldsymbol{H})) = (\boldsymbol{ad}^i_{\boldsymbol{\Omega}}(\boldsymbol{H}))\boldsymbol{\Omega} + \boldsymbol{ad}^{i+1}_{\boldsymbol{\Omega}}(\boldsymbol{H})$，最后可得

$$\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\boldsymbol{\Omega}}\boldsymbol{\Omega}^k\right)\boldsymbol{H} = \sum_{i=0}^{k-1}\binom{k}{i+1}(\boldsymbol{ad}^i_{\boldsymbol{\Omega}}(\boldsymbol{H}))\boldsymbol{\Omega}^{k-i-1} \tag{3.58}$$

定理 3.6　指数映射 $\exp\boldsymbol{\Omega} = \sum_{k\geqslant 0}\frac{1}{k!}\boldsymbol{\Omega}^k$ 的导数为

$$\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\boldsymbol{\Omega}}\exp\boldsymbol{\Omega}\right)\boldsymbol{H} = (\mathrm{dexp}_{\boldsymbol{\Omega}}(\boldsymbol{H}))\exp\boldsymbol{\Omega} \tag{3.59}$$

式中

$$\mathrm{dexp}_{\boldsymbol{\Omega}}(\boldsymbol{H}) = \sum_{k\geqslant 0}\frac{1}{(k+1)!}\boldsymbol{ad}^k_{\boldsymbol{\Omega}}\boldsymbol{H} \tag{3.60}$$

级数式(3.60) 对于所有的 $\boldsymbol{\Omega}$ 矩阵收敛。

证明　在式(3.58) 的两边同乘 $(k!)^{-1}$，将各项取和，记 $j = k-i-1$，不难得到

$$\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\boldsymbol{\Omega}}\exp\boldsymbol{\Omega}\right)\boldsymbol{H} = \sum_{k\geqslant 0}\frac{1}{k!}\sum_{i=0}^{k-1}\binom{k}{i+1}(\boldsymbol{ad}^i_{\boldsymbol{\Omega}}(\boldsymbol{H}))\boldsymbol{\Omega}^{k-i-1} =$$

$$\sum_{i\geqslant 0}\sum_{j\geqslant 0}\frac{1}{(i+1)!j!}(\boldsymbol{ad}^i_{\boldsymbol{\Omega}}(\boldsymbol{H}))\boldsymbol{\Omega}^j$$

因为 $\|\boldsymbol{ad}_{\boldsymbol{\Omega}}\| \leqslant 2\|\boldsymbol{\Omega}\|$，所以前述级数收敛。

定理 3.7　如果线性算子 $\boldsymbol{ad}_{\boldsymbol{\Omega}}$ 的特征值不等于 $2l\pi i$，$l \in \{\pm 1, \pm 2, \cdots\}$，那么 $\mathrm{dexp}_{\boldsymbol{\Omega}}$ 是可逆的，当 $\|\boldsymbol{\Omega}\| < \pi$ 时它的逆为

$$\mathrm{dexp}_{\boldsymbol{\Omega}}^{-1}(\boldsymbol{H}) = \sum_{k\geqslant 0} \frac{B_k}{k!} \boldsymbol{ad}_{\boldsymbol{\Omega}}^k \boldsymbol{H} \tag{3.61}$$

式中，B_k 为由 $\sum_{k\geqslant 0}\left(\frac{B_k}{k!}\right)x^k = \frac{x}{(\mathrm{e}^x - 1)}$ 定义的伯努利数。

证明　$\mathrm{dexp}_{\boldsymbol{\Omega}}$ 的特征值为 $\mu = \sum_{k\geqslant 0}\lambda^k/(k+1)! = (\mathrm{e}^\lambda - 1)/\lambda$，其中，$\lambda$ 是 $\boldsymbol{ad}_{\boldsymbol{\Omega}}$ 的特征值。根据假设可知 $\mu \neq 0$，所以 $\mathrm{dexp}_{\boldsymbol{\Omega}}$ 可逆。根据伯努利数的定义，式(3.60) 和式(3.61) 的复合即得到恒等算子。再根据 $\|\boldsymbol{ad}_{\boldsymbol{\Omega}}\| \leqslant 2\|\boldsymbol{\Omega}\|$ 并考虑 $x/(\mathrm{e}^x - 1)$ 的级数的收敛半径为 2π，所以当 $\|\boldsymbol{\Omega}\| < \pi$ 时，式(3.61) 收敛。

3.4.2　BCH 公式

设 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 是两个不可交换的矩阵，我们的问题是求一个矩阵 $\boldsymbol{C}(t)$，使得

$$\exp(t\boldsymbol{A})\exp(t\boldsymbol{B}) = \exp\boldsymbol{C}(t) \tag{3.62}$$

成立。首先把式(3.62) 等号左边展开为一个幂级数形式为

$$\begin{aligned}\exp(t\boldsymbol{A})\exp(t\boldsymbol{B}) = {} & \boldsymbol{I} + t(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}) + \\ & \frac{t^2}{2}(\boldsymbol{A}^2 + \boldsymbol{AB} + \boldsymbol{BA} + \boldsymbol{B}^2) + O(t^3) := \\ & \boldsymbol{I} + \boldsymbol{X}\end{aligned}$$

如果时间 t 足够小($\|\boldsymbol{X}\|$ 也很小)，那么对数函数的级数展开为

$$\lg(\boldsymbol{I}+\boldsymbol{X}) = \boldsymbol{X} - \boldsymbol{X}^2/2 + \cdots$$

将产生矩阵 $\boldsymbol{C}(t) = \lg(\boldsymbol{I}+\boldsymbol{X}) = t(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}) + \frac{t^2}{2}(\boldsymbol{A}^2 + \boldsymbol{AB} + \boldsymbol{BA} + \boldsymbol{B}^2) + O(t^3)$，使之满足式(3.62)。因为它由收敛级数的基本运算得到，所以它有正收敛半径。

定理 3.8　设 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 是两个不可交换的矩阵，那么式(3.62) 成立，其中的 $\boldsymbol{C}(t)$ 是微分方程

$$\dot{\boldsymbol{C}} = \boldsymbol{A} + \boldsymbol{B} + \frac{1}{2}[\boldsymbol{A} - \boldsymbol{B}, \boldsymbol{C}] + \sum_{k\geqslant 2}\frac{B_k}{k!}\boldsymbol{ad}_{\boldsymbol{C}}^k(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}) \tag{3.63}$$

的解。其初始条件为$\boldsymbol{C}(0)=0$，$\boldsymbol{ad}_{\boldsymbol{C}}\boldsymbol{A}=[\boldsymbol{C},\boldsymbol{A}]=\boldsymbol{CA}-\boldsymbol{AC}$，而$B_k$是伯努利数。

证明 首先考虑关于较小的s和t的矩阵函数$\boldsymbol{Z}(s,t)$，满足

$$\exp(s\boldsymbol{A})\exp(t\boldsymbol{B})=\exp\boldsymbol{Z}(s,t) \tag{3.64}$$

应用定理 3.6 将式(3.64)对s求导数，可得

$$\boldsymbol{A}\exp(s\boldsymbol{A})\exp(t\boldsymbol{B})=\mathrm{dexp}_{\boldsymbol{Z}(s,t)}\left(\frac{\partial \boldsymbol{Z}}{\partial s}(s,t)\right)\exp\boldsymbol{Z}(s,t)$$

因此

$$\frac{\partial \boldsymbol{Z}}{\partial s}=\mathrm{dexp}_{\boldsymbol{Z}}^{-1}(\boldsymbol{A})=\boldsymbol{A}-\frac{1}{2}[\boldsymbol{Z},\boldsymbol{A}]+\sum_{k\geqslant 2}\frac{B_k}{k!}\boldsymbol{ad}_{\boldsymbol{Z}}^{k}(\boldsymbol{A}) \tag{3.65}$$

对式(3.64)的两边进行求逆，可得

$$\exp(-t\boldsymbol{B})\exp(-s\boldsymbol{A})=\exp(-\boldsymbol{Z}(s,t))$$

将上式对t求导数，类似于式(3.65)，可得

$$\frac{\partial \boldsymbol{Z}}{\partial t}=\mathrm{dexp}_{-\boldsymbol{Z}}^{-1}(\boldsymbol{B})=\boldsymbol{B}+\frac{1}{2}[\boldsymbol{Z},\boldsymbol{B}]+\sum_{k\geqslant 2}\frac{B_k}{k!}\boldsymbol{ad}_{\boldsymbol{Z}}^{k}(\boldsymbol{B}) \tag{3.66}$$

式中，用到了$\boldsymbol{ad}_{-\boldsymbol{Z}}^{k}(\boldsymbol{B})=(-1)^k\boldsymbol{ad}_{\boldsymbol{Z}}^{k}(\boldsymbol{B})$，而对于所有$k>2$的奇数，伯努利数均为零。

将式(3.62)和式(3.64)进行对照，不难发现$\boldsymbol{C}(t)=\boldsymbol{Z}(t,t)$，因此有

$$\dot{\boldsymbol{C}}(t)=\frac{\partial \boldsymbol{Z}}{\partial s}(t,t)+\frac{\partial \boldsymbol{Z}}{\partial t}(t,t)$$

再根据式(3.65)和式(3.66)计算并相加，即可得式(3.63)。

根据定理 3.8，即可以计算$\boldsymbol{C}(t)$的 Taylor 展开的系数，即

$$\exp(t\boldsymbol{A})\exp(t\boldsymbol{B})=\exp(t\boldsymbol{C}_1+t^2\boldsymbol{C}_2+t^3\boldsymbol{C}_3+t^4\boldsymbol{C}_4+t^5\boldsymbol{C}_5+\cdots) \tag{3.67}$$

把式(3.67)代入式(3.63)，比较两边的同类项，并根据 Jacobi 恒等式，即

$$[\boldsymbol{A},[\boldsymbol{B},\boldsymbol{C}]]+[\boldsymbol{C},[\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}]]+[\boldsymbol{B},[\boldsymbol{C},\boldsymbol{A}]]=0$$

进行化简，可得

$$\left.\begin{aligned}
\boldsymbol{C}_1 &= \boldsymbol{A}+\boldsymbol{B} \\
\boldsymbol{C}_2 &= \frac{1}{2}[\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}] \\
\boldsymbol{C}_3 &= \frac{1}{12}[\boldsymbol{A},[\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}]]+\frac{1}{12}[\boldsymbol{B},[\boldsymbol{B},\boldsymbol{A}]] \\
\boldsymbol{C}_4 &= \frac{1}{24}[\boldsymbol{A},[\boldsymbol{B},[\boldsymbol{B},\boldsymbol{A}]]] \\
\boldsymbol{C}_5 &= -\frac{1}{720}[\boldsymbol{A},[\boldsymbol{A},[\boldsymbol{A},[\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}]]]]-\frac{1}{720}[\boldsymbol{B},[\boldsymbol{B},[\boldsymbol{B},[\boldsymbol{B},\boldsymbol{A}]]]]+ \\
&\quad \frac{1}{360}[\boldsymbol{A},[\boldsymbol{B},[\boldsymbol{B},[\boldsymbol{B},\boldsymbol{A}]]]]+\frac{1}{360}[\boldsymbol{B},[\boldsymbol{A},[\boldsymbol{A},[\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}]]]]+ \\
&\quad \frac{1}{120}[\boldsymbol{A},[\boldsymbol{A},[\boldsymbol{B},[\boldsymbol{B},\boldsymbol{A}]]]]+\frac{1}{120}[\boldsymbol{B},[\boldsymbol{B},[\boldsymbol{A},[\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}]]]]
\end{aligned}\right\} \tag{3.68}$$

对于更高阶的表示非常复杂。

以后构造算法，经常要用到对称形式的 BCH 公式，即

$$\exp\left(\frac{t}{2}\boldsymbol{A}\right)\exp(t\boldsymbol{B})\exp\left(\frac{t}{2}\boldsymbol{A}\right)=\exp(t\,\boldsymbol{S}_1+t^3\boldsymbol{S}_3+t^5\boldsymbol{S}_5+\cdots) \tag{3.69}$$

因为上式左端的逆可以通过改变 t 的符号获得，右端也一样，因此右端仅含有 t 的奇数次项。先应用 BCH 公式（式(3.67)），求 $\exp\left(\frac{t}{2}\boldsymbol{A}\right)\exp\left(\frac{t}{2}\boldsymbol{B}\right)=\exp\boldsymbol{C}(t)$，而后再次将 BCH 公式应用于 $\exp\boldsymbol{C}(t)\exp(-\boldsymbol{C}(-t))$ 中，不难求得式(3.69) 中的各系数，即

$$\left.\begin{aligned}
\boldsymbol{S}_1 &= \boldsymbol{A}+\boldsymbol{B} \\
\boldsymbol{S}_3 &= -\frac{1}{24}[\boldsymbol{A},[\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}]]+\frac{1}{12}[\boldsymbol{B},[\boldsymbol{B},\boldsymbol{A}]] \\
\boldsymbol{S}_5 &= \frac{7}{5\,760}[\boldsymbol{A},[\boldsymbol{A},[\boldsymbol{A},[\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}]]]]-\frac{1}{720}[\boldsymbol{B},[\boldsymbol{B},[\boldsymbol{B},[\boldsymbol{B},\boldsymbol{A}]]]]+ \\
&\quad \frac{1}{360}[\boldsymbol{A},[\boldsymbol{B},[\boldsymbol{B},[\boldsymbol{B},\boldsymbol{A}]]]]+\frac{1}{360}[\boldsymbol{B},[\boldsymbol{A},[\boldsymbol{A},[\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}]]]]- \\
&\quad \frac{1}{480}[\boldsymbol{A},[\boldsymbol{A},[\boldsymbol{B},[\boldsymbol{B},\boldsymbol{A}]]]]+\frac{1}{120}[\boldsymbol{B},[\boldsymbol{B},[\boldsymbol{A},[\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}]]]]
\end{aligned}\right\} \tag{3.70}$$

类似地，还有

$$\exp(\boldsymbol{A})\exp(t\boldsymbol{B})\exp(\boldsymbol{A}) = \exp(t\boldsymbol{W}_1 + t^3\boldsymbol{W}_3 + t^5\boldsymbol{W}_5 + \cdots) \tag{3.71}$$

其中

$$\left.\begin{aligned}
\boldsymbol{W}_1 &= 2\boldsymbol{A} + \boldsymbol{B} \\
\boldsymbol{W}_3 &= -\frac{1}{6}[\boldsymbol{A},[\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}]] + \frac{1}{6}[\boldsymbol{B},[\boldsymbol{B},\boldsymbol{A}]] \\
\boldsymbol{W}_5 &= \frac{7}{360}[\boldsymbol{A},[\boldsymbol{A},[\boldsymbol{A},[\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}]]]] - \frac{1}{360}[\boldsymbol{B},[\boldsymbol{B},[\boldsymbol{B},[\boldsymbol{B},\boldsymbol{A}]]]] + \\
&\quad \frac{1}{90}[\boldsymbol{A},[\boldsymbol{B},[\boldsymbol{B},[\boldsymbol{B},\boldsymbol{A}]]]] + \frac{1}{45}[\boldsymbol{B},[\boldsymbol{A},[\boldsymbol{A},[\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}]]]] - \\
&\quad \frac{1}{60}[\boldsymbol{A},[\boldsymbol{A},[\boldsymbol{B},[\boldsymbol{B},\boldsymbol{A}]]]] + \frac{1}{30}[\boldsymbol{B},[\boldsymbol{B},[\boldsymbol{A},[\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}]]]]
\end{aligned}\right\} \tag{3.72}$$

3.4.3　对称合成高阶算法

显然，由式(3.71)确定的算法不包含 t 的偶次幂，它关于时间是可逆的，即

$$\boldsymbol{S}(t)\boldsymbol{S}(-t) = \boldsymbol{S}(-t)\boldsymbol{S}(t) = \boldsymbol{id} \tag{3.73}$$

称其为对称的。Yoshida 用一种间接的方法构造高阶算法。

定理 3.9　关于时间对称的算子，其形式为

$$\begin{aligned}\boldsymbol{S}(t) = \prod_{i=1}^{k}\exp(c_i t\boldsymbol{A})\exp(d_i t\boldsymbol{B}) = \\ \exp(t(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}) + O(t^{n+1}))\end{aligned} \tag{3.74}$$

如果把 $\boldsymbol{S}(t)$ 展开为

$$\boldsymbol{S}(t) = \exp(t\boldsymbol{S}_1 + t^2\boldsymbol{S}_2 + t^3\boldsymbol{S}_3 + t^4\boldsymbol{S}_4 + \cdots) \tag{3.75}$$

那么，$\boldsymbol{S}_2 = \boldsymbol{S}_4 = \boldsymbol{S}_6 = 0$。

证明　将 $\boldsymbol{S}(t)$ 和 $\boldsymbol{S}(-t) = \exp(-t\boldsymbol{S}_1 + t^2\boldsymbol{S}_2 - t^3\boldsymbol{S}_3 + t^4\boldsymbol{S}_4 - \cdots)$ 相乘，根据 BCH 公式(式(3.67))，对于 t 的低次幂，有

$$\boldsymbol{S}(t)\boldsymbol{S}(-t) = \exp[2t^2\boldsymbol{S}_2 + O(t^3)] \tag{3.76}$$

因为 $\boldsymbol{S}(t)\boldsymbol{S}(-t) = \boldsymbol{id}$，所以 $2t^2\boldsymbol{S}_2 + O(t^3) = 0, \boldsymbol{S}_2 = 0$。同理，对于高阶项，有 $\boldsymbol{S}(t)\boldsymbol{S}(-t) = \exp[2t^4\boldsymbol{S}_4 + O(t^5)]$，要求 $\boldsymbol{S}_4 = 0$ 及 $\boldsymbol{S}_6 = \boldsymbol{S}_8 = \cdots = 0$。

下面由低阶的对称数值格式（如 Hamilton 系统的辛算法）来构造高阶对称方法。可以通过合成两个二阶的对称格式来构造四阶方法，即

$$\boldsymbol{S}_{4\text{th}}(t) := \boldsymbol{S}_{2\text{nd}}(x_1 t)\boldsymbol{S}_{2\text{nd}}(x_0 t)\boldsymbol{S}_{2\text{nd}}(x_1 t) \tag{3.77}$$

式中，x_0 和 x_1 是两个待定的实数。记

$$\boldsymbol{S}_{2\text{nd}}(x_1 t) = \exp(tx_1\boldsymbol{S}_1 + t^3x_1^3\boldsymbol{S}_3 + t^5x_1^5\boldsymbol{S}_5 + \cdots) \tag{3.78}$$

和

$$\boldsymbol{S}_{2\text{nd}}(x_0 t) = \exp(tx_0\boldsymbol{S}_1 + t^3x_0^3\boldsymbol{S}_3 + t^5x_0^5\boldsymbol{S}_5 + \cdots) \tag{3.79}$$

那么有四阶算法，即

$$\boldsymbol{S}_{4\text{th}}(t) = \exp(t(x_0 + 2x_1)\boldsymbol{S}_1 + t^3(x_0^3 + 2x_1^3)\boldsymbol{S}_3 + t^5(x_1^5 + 2x_1^5)\boldsymbol{S}_5 + \cdots) \tag{3.80}$$

为了使得式(3.80)达到四阶精度，需要两个条件，即

$$x_0 + 2x_1 = 1, \quad x_0^3 + 2x_1^3 = 0 \tag{3.81}$$

显然式(3.81)有惟一解，即

$$x_0 = -\frac{2^{1/3}}{2 - 2^{1/3}}, \quad x_1 = \frac{1}{2 - 2^{1/3}} \tag{3.82}$$

将式(3.80)和式(3.74)进行比较，不难发现它们的系数之间的联系为

$$d_1 = d_2 = x_1, \quad d_2 = x_0$$

$$c_1 = c_4 = \frac{1}{2}x_1, \quad c_2 = c_3 = \frac{1}{2}(x_0 + x_1)$$

同理，可以在四阶方法的基础上构造六阶方法。假设四阶方法有如下展开式：

$$\boldsymbol{S}_{4\text{th}}(t) = \exp(t\boldsymbol{S}_1 + t^5\tilde{\boldsymbol{S}}_5 + t^7\tilde{\boldsymbol{S}}_7 + O(t^9)) \tag{3.83}$$

我们设法对称合成一个六阶格式为

$$\boldsymbol{S}_{6\text{th}}(t):=\boldsymbol{S}_{4\text{th}}(y_1 t)\boldsymbol{S}_{4\text{th}}(y_0 t)\boldsymbol{S}_{4\text{th}}(y_1 t) \tag{3.84}$$

同前面的过程类似，根据对称 BCH 公式（式(3.71)），式(3.84) 有如下展开式：

$$\boldsymbol{S}_{6\text{th}}(t)=\exp(t(y_0+2y_1)\boldsymbol{S}_1+t^5(y_0^5+2y_1^5)\tilde{\boldsymbol{S}}_5+\cdots) \tag{3.85}$$

为了使得式(3.85) 达到六阶精度，需要两个条件，即

$$y_0+2y_1=1,\quad y_0^5+2y_1^5=0 \tag{3.86}$$

即要求

$$y_0=-\frac{2^{1/5}}{2-2^{1/5}},\quad y_1=\frac{1}{2-2^{1/5}} \tag{3.87}$$

更一般地，如果已知一个 $2n$ 阶的对称积分格式，就可以构造$(2n+2)$ 阶积分格式为

$$\boldsymbol{S}_{2n+2}(t):=\boldsymbol{S}_{2n}(z_1 t)\boldsymbol{S}_{2n}(z_0 t)\boldsymbol{S}_{2n}(z_1 t) \tag{3.88}$$

式中，z_0 和 z_1 满足

$$z_0+2z_1=1,\quad z_0^{2n+1}+2z_1^{2n+1}=0 \tag{3.89}$$

或

$$z_0=-\frac{2^{1/(2n+1)}}{2-2^{1/(2n+1)}},\quad z_1=\frac{1}{2-2^{1/(2n+1)}} \tag{3.90}$$

把式(3.85) 和式(3.77) 相结合，就得到

$$\begin{aligned}\boldsymbol{S}_{6\text{th}}(t):=&\ \boldsymbol{S}_{2\text{nd}}(x_1 y_1 t)\boldsymbol{S}_{2\text{nd}}(x_0 y_1 t)\boldsymbol{S}_{2\text{nd}}(x_1 y_1 t)\times\\&\ \boldsymbol{S}_{2\text{nd}}(x_1 y_0 t)\boldsymbol{S}_{2\text{nd}}(x_0 y_0 t)\boldsymbol{S}_{2\text{nd}}(x_1 y_0 t)\times\\&\ \boldsymbol{S}_{2\text{nd}}(x_1 y_1 t)\boldsymbol{S}_{2\text{nd}}(x_1 y_0 t)\boldsymbol{S}_{2\text{nd}}(x_1 y_1 t)\end{aligned} \tag{3.91}$$

这样就可以构造具有精确系数的任意高阶的积分格式，当然由辛积分格式合成的是辛积分。由上述可见，构造 $2n$ 阶积分格式需要计算 3^{n-1} 次算子 $\boldsymbol{S}_{2\text{nd}}$，总的合成步数为 $k=3^{n-1}+1$，当 n 增加时，计算量迅速增加。为此 Yoshida 给出下述经济适用的替代方法来构造高阶算法，但其中的系数不再是精确确定的。他定义对称积分算子为

$$\boldsymbol{S}^{(m)}(t):=\boldsymbol{S}_{2\mathrm{nd}}(w_m t)\times\cdots\times\boldsymbol{S}_{2\mathrm{nd}}(w_1 t)\times\boldsymbol{S}_{2\mathrm{nd}}(w_0 t)\times \boldsymbol{S}_{2\mathrm{nd}}(w_1 t)\times\cdots\times\boldsymbol{S}_{2\mathrm{nd}}(w_m t) \tag{3.92}$$

式中，$w_0, w_1, \cdots, w_m$ 是待定系数。应用对称 BCH 公式(式(3.71))来表示式(3.92)，类似于式(3.80)。另外除了算子 $\boldsymbol{S}_1, \boldsymbol{S}_3, \boldsymbol{S}_5$ 及 $\boldsymbol{S}_7$ 之外，关于 t^5 还有 $\boldsymbol{R}_5=(\boldsymbol{S}_1, \boldsymbol{S}_1, \boldsymbol{S}_3)$；关于 t^7 还有 $\boldsymbol{R}_7=(\boldsymbol{S}_1, \boldsymbol{S}_1, \boldsymbol{S}_5)$，$\boldsymbol{Y}_7=(\boldsymbol{S}_3, \boldsymbol{S}_3, \boldsymbol{S}_1)$ 以及 $\boldsymbol{P}_7=(\boldsymbol{S}_1, \boldsymbol{S}_1, \boldsymbol{S}_1, \boldsymbol{S}_1, \boldsymbol{S}_3)$。那么，可以把式(3.92)写成如下形式：

$$\boldsymbol{S}^{(m)}(t)=\exp[tA_{1,m}\boldsymbol{S}_1+t^3A_{3,m}\boldsymbol{S}_3+t^5(A_{5,m}\boldsymbol{S}_5+B_{5,m}\boldsymbol{R}_5)+ t^7(A_{7,m}\boldsymbol{S}_7+B_{7,m}\boldsymbol{R}_7+C_{7,m}\boldsymbol{Y}_7+D_{7,m}\boldsymbol{P}_7)+O(t^9)] \tag{3.93}$$

应用式(3.71)，并比较

$$\boldsymbol{S}^{(m+1)}(t):=\boldsymbol{S}_{2n}(w_{m+1}t)\boldsymbol{S}^{(m)}(t)\boldsymbol{S}_{2n}(w_{m+1}t) \tag{3.94}$$

与式(3.93)的两边，可得

$$A_{1,m+1}=A_{1,m}+2w_{m+1} \tag{3.95}$$

$$A_{3,m+1}=A_{3,m}+2w_{m+1}^3 \tag{3.96}$$

$$A_{5,m+1}=A_{5,m}+2w_{m+1}^5 \tag{3.97}$$

$$A_{7,m+1}=A_{7,m}+2w_{m+1}^7 \tag{3.98}$$

………………

其初始条件为

$$A_{1,0}=w_0,\ A_{3,0}=w_0^3,\ A_{5,0}=w_0^5,\ A_{7,0}=w_0^7,\ \cdots$$

对于其他系数，有如下等式：

$$B_{5,m+1}=B_{5,m}+\frac{1}{6}(A_{1,m}^1 w_{m+1}^3-A_{1,m}A_{3,m}w_{m+1})-\frac{1}{6}(A_{3,m}w_{m+1}^2-A_{1,m}w_{m+1}^4) \tag{3.99}$$

$$B_{7,m+1}=B_{7,m}+\frac{1}{6}(A_{1,m}^2 w_{m+1}^5-A_{1,m}A_{5,m}w_{m+1})-\frac{1}{6}(A_{5,m}w_{m+1}^2-A_{1,m}w_{m+1}^6) \tag{3.100}$$

$$C_{7,m+1}=C_{7,m}+\frac{1}{6}(A_{3,m}^2w_{m+1}-A_{1,m}A_{3,m}w_{m+1}^3)-\frac{1}{6}(A_{1,m}w_{m+1}^6-A_{3,m}w_{m+1}^4) \quad (3.101)$$

$$\begin{aligned}D_{7,m+1}=&D_{7,m}+7(A_{3,m}w_{m+1}^4-A_{1,m}w_{m+1}^6)+\\&\frac{7}{180}(A_{1,m}A_{3,m}w_{m+1}^3-A_{1,m}^2w_{m+1}^5)-\\&\frac{1}{45}(A_{1,m}^3w_{m+1}^4-A_{1,m}^2A_{3,m}w_{m+1}^2)-\\&\frac{1}{360}(A_{1,m}^4w_{m+1}^3-A_{1,m}^3A_{3,m}w_{m+1})-\\&\frac{1}{6}(B_{5,m}w_{m+1}^2+A_{1,m}B_{5,m}w_{m+1})\end{aligned} \quad (3.102)$$

其初始条件为 $B_{5,0}=B_{7,0}=C_{7,0}=D_{7,0}=0$。

对于 $A_{j,m}$，显然有

$$A_{1,m}=w_0+2(w_1+w_2+\cdots+w_m) \quad (3.103)$$

$$A_{3,m}=w_0^3+2(w_1^3+w_2^3+\cdots+w_m^3) \quad (3.104)$$

$$A_{5,m}=w_0^5+2(w_1^5+w_2^5+\cdots+w_m^5) \quad (3.105)$$

$$A_{7,m}=w_0^7+2(w_1^7+w_2^7+\cdots+w_m^7) \quad (3.106)$$

但是对其他系数，结构可不是很简单的。因为给定 m，$B_{5,m}=B_{5,m}(w_0,w_1,\cdots,w_m)$ 是一个五阶的齐次多项式，而 $B_{7,m}$，$C_{7,m}$ 和 $D_{7,m}$ 都是关于$(w_0,w_1,\cdots,w_m)$的七阶齐次多项式。为了给出形如式(3.93)的六阶的积分格式，需要如下四个等式：

$$A_{1,m}=1,\ A_{3,m}=0,\ A_{5,m}=0,\ B_{5,m}=0 \quad (3.107)$$

因此式(3.93)中的 $m=3$，求解代数方程式(3.107)即可得到所求的六阶积分格式。为了给出形如式(3.93)的八阶的积分格式，还需要另外的四个等式，即

$$A_{7,m}=0,\ B_{7,m}=0,\ C_{7,m}=0,\ D_{7,m}=0 \quad (3.108)$$

因此 $m=7$，求解代数方程式(3.107)及式(3.108)即可得到所求的八阶积分格式。另外，总可以通过应用 $A_{1,m}=1$，即

$$w_0 = 1 - 2(w_1 + w_2 + \cdots + w_m) \tag{3.109}$$

来约减一个代数方程。用数值方法求解得到关于$(w_0, w_1, \cdots, w_m)$的数值解列于下表，关于六阶算法有3组解，见表3.1，而对于八阶算法有5组解，见表3.2。

表 3.1　六阶积分格式系数

	第一组解	第二组解	第三组解
w_1	−0.117767998417887E1	−0.213228522200144E1	0.152886228424922E−2
w_2	0.235573213359357E0	0.426068187079180E−2	−0.214403531630539E1
w_3	0.784513610477560E0	0.143984816797678E1	0.144778256239930E1

表 3.2　八阶积分格式系数

	第一组解	第二组解	第三组解
w_1	−0.161582374150097E1	−0.169248587770116E−2	0.311790812418427E0
w_2	−0.244699182370524E1	0.289195744315849E1	−0.155946803821447E1
w_3	−0.716989419708120E−2	0.378039588360192E−2	−0.167896928259640E1
w_4	0.244002732616735E1	−0.289688250328827E1	0.166335809963315E1
w_5	0.157739928123617E0	0.289105148970595E1	−0.106458714789183E1
w_6	0.182020630970714E1	−0.233864815101035E1	0.136934946416871E1
w_7	0.104242620869991E1	0.148819229202922E1	0.629030650210433E0

	第四组解	第五组解
w_1	0.102799849391985E0	0.227738840094906E−1
w_2	−0.196061023297549E1	0.252778927322839E1
w_3	0.193813913762276E1	−0.719180053552772E−1
w_4	−0.158240635368243E0	0.536018921307285E−2
w_5	−0.144485223686048E1	−0.204809795887393E1
w_6	0.253693336566229E0	0.107990467703699E0
w_7	0.914844246229740E0	0.130300165760014E1

由上述可见，构造六阶算法（$n=3$）的合成步数为 $k=8$，而八阶算法的合成步数为 $k=16$，比起原来六阶算法时 $k=10$，八阶算法时 $k=28$，该处理方法具有明显的优越性。

3.5 耗散广义 Hamilton 自治系统的数值解法

3.5.1 基本方程

考虑广义 Hamilton 系统的常微分方程初值问题：

$$\frac{d\boldsymbol{x}}{dt}=\boldsymbol{M}(\boldsymbol{x})\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{x}},\ \boldsymbol{x}(0)=\boldsymbol{x}_0 \tag{3.110}$$

式中，H 是 Hamilton 函数，$\boldsymbol{M}$ 是任意 $n\times n$ 矩阵（$\boldsymbol{M}$ 是反对称矩阵时，对应保守系统），其元素是 $\boldsymbol{x}$ 的光滑函数。

模仿前面保守广义 Hamilton 系统的讨论，以 $\boldsymbol{M}(\boldsymbol{x})$ 作为结构矩阵来定义伪 Poisson 括号以及伪 Poisson 流形[14]。而后，在伪 Poisson 流形上讨论耗散广义 Hamilton 系统的保结构算法。

定义 3.9 设 M 为 n 维光滑流形，则有：

（1）M 上的伪 Poisson 括号 $\{,\}$ 是一个 $C^\infty(M)\times C^\infty(M)\rightarrow C^\infty(M)$ 的光滑映射，满足：① 双线性性，②Leibniz 法则；

（2）一个伪 Poisson 括号称为对称的，如果 $\{F,G\}=\{G,F\}$，则称为反对称的；如果 $\{F,G\}=-\{G,F\}$，则 $\forall F,G\in C^\infty(M)$。

定义 3.10 一个伪 Poisson 流形是一个流形带上由定义 3.9 确定的伪 Poisson 括号。

同定义 3.1 中的广义 Poisson 括号一样，伪 Poisson 括号也由其结构矩阵惟一确定，即 $\{F,G\}=\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}M_{ij}(\boldsymbol{x})\frac{\partial F}{\partial x_i}\frac{\partial G}{\partial x_j}$。其中，$M_{ij}(\boldsymbol{x})$ 是伪 Poisson 括号的结构矩阵 $\boldsymbol{M}(\boldsymbol{x})$ 的元素。

由 Leibniz 法则，对每一个 $H\in C^\infty(M)$，都可以定义一个向量

场，记作 $\boldsymbol{Z}_H$，并称其为由 Hamilton 函数 H 所确定的广义 Hamilton 向量场。具体定义为：$\boldsymbol{D}_H G = \boldsymbol{L}_{\boldsymbol{Z}_H} G = \{G,H\}$，$\forall G \in C^{\infty}(M)$，$\boldsymbol{D}_H$ 是一个算子，可见，伪 Poisson 括号$\{G,H\}$就是函数 G 沿着向量场 $\boldsymbol{Z}_H$ 的方向导数。于是可以将算子 $\boldsymbol{D}_H$ 按时间参数 t 在局部坐标下表示为

$$\boldsymbol{D}_H = \sum_{i,j=1}^{n} \frac{\partial H}{\partial x_i} M_{ji}(\boldsymbol{x}) \frac{\partial}{\partial x_j} \tag{3.111}$$

那么，广义 Hamilton 系统式(3.110) 可写为

$$\dot{\boldsymbol{x}} = \{\boldsymbol{x}, H\}, \text{ or } \dot{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{D}_H \boldsymbol{x} \tag{3.112}$$

从此以后，$\{,\}$ 均指伪 Poisson 括号。运动方程式(3.110) 及式(3.112) 的解可以通过映射 $\boldsymbol{\Psi}(\boldsymbol{x}_0, t)$ 给出，即 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{\Psi}(\boldsymbol{x}_0, t)\boldsymbol{x}_0$，当然可以应用第二章的李级数方法求解，但是，耗散系统相对较复杂，在此通过分裂合成的方法[16] 求近似的 $\boldsymbol{\Psi}(\boldsymbol{x}_0, t)$。

3.5.2 数值积分方法

讨论广义 Hamilton 系统式(3.112)：

$$\dot{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{D}_H \boldsymbol{x} = \{\boldsymbol{x}, H\} = \boldsymbol{M}(\boldsymbol{x}) \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{x}}, \ \boldsymbol{x}(0) = \boldsymbol{x}_0$$

它是一个由 Hamilton 函数推得的微分方程，（自然地）具有伪 Poisson 括号结构。该方程的形式解或称 $\boldsymbol{x}(t)$ 从 $t=0$ 到 $t=h$ 的精确时间历程，可由 $\boldsymbol{x}(h) = \exp(h\boldsymbol{D}_H)\boldsymbol{x}_0$ 给出。如果算子 $\boldsymbol{D}_H$ 能分裂成不可交换的两部分 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$，即$[\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}] = \boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B} - \boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{A} \neq 0$，其中，$[\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}]$同第二章一样表示算子 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 的交换子。当然，$\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 应属于原李代数（例如，可以取 $\boldsymbol{A} = \sum_{i,j=1}^{n} \frac{\partial H_1}{\partial x_i} M_{ji}(\boldsymbol{x}) \frac{\partial}{\partial x_j}$ 等等），而且，$\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 看做独立的微分算子时能精确积分，那么，式(3.112) 的解可以表示为

$$\boldsymbol{x}(h) = \boldsymbol{\Psi}(\boldsymbol{x}_0, h)\boldsymbol{x}_0 = \exp(h\boldsymbol{D}_H)\boldsymbol{x}_0 =$$

$$\left(\prod_{i=1}^{k}\exp(c_i h\boldsymbol{A})\exp(d_i h\boldsymbol{B})\right)\boldsymbol{x}_0 + O(h^{m+1}) \qquad (3.113)$$

当 $m = 2$(二阶积分)时,最简单的形式是 $k = 2$, $c_1 = c_2 = \frac{1}{2}$, $d_1 = 1$, $d_2 = 0$。当 $m = 4$ 时,积分公式为

$$\boldsymbol{x}(h) = \boldsymbol{\Psi}(\boldsymbol{x}_0, h)\boldsymbol{x}_0 = \exp(h\boldsymbol{D}_H)\boldsymbol{x}_0 =$$

$$\left(\prod_{i=1}^{4}\exp(c_i h\boldsymbol{A})\exp(d_i h\boldsymbol{B})\right)\boldsymbol{x}_0 + O(h^5) \qquad (3.114)$$

式中

$$c_1 = c_4 = \frac{1}{2(1+\alpha)}, \quad d_1 = d_3 = \frac{1}{1+\alpha}$$

$$c_2 = c_3 = \frac{\alpha}{2(1+\alpha)}, \quad d_2 = \frac{\alpha - 1}{1+\alpha}, \quad d_4 = 0$$

及

$$\alpha = 1 - 2^{1/3}$$

事实上,合成积分方法是基于 Baker-Campbell-Hausdorff(BCH)公式。对于两个形如 $e^{h\boldsymbol{A}}$ 和 $e^{h\boldsymbol{B}}$ 的群元,它们的乘积可由一个含有交换子的公式近似,即

$$e^{\boldsymbol{C}} = e^{h\boldsymbol{A}} \cdot e^{h\boldsymbol{B}} \qquad (3.115)$$

$$\boldsymbol{C} = h\boldsymbol{A} + h\boldsymbol{B} + \frac{1}{2}h^2[\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}] +$$

$$\frac{1}{12}h^3([\boldsymbol{A},\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}] + [\boldsymbol{B},\boldsymbol{B},\boldsymbol{A}]) + \frac{1}{24}h^4[\boldsymbol{A},\boldsymbol{B},\boldsymbol{B},\boldsymbol{A}] + \cdots$$

对于三个群元的乘积近似公式为

$$e^{\boldsymbol{W}} = e^{\frac{1}{2}h\boldsymbol{A}} \cdot e^{h\boldsymbol{B}} \cdot e^{\frac{1}{2}h\boldsymbol{A}}$$

$$\boldsymbol{W} = h(\boldsymbol{A} + \boldsymbol{B}) + \frac{1}{12}h^3\left([\boldsymbol{B},\boldsymbol{B},\boldsymbol{A}] - \frac{1}{2}[\boldsymbol{A},\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}]\right) + \cdots$$

式中用到了高阶交换子,如 $[\boldsymbol{A},\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}] = [\boldsymbol{A},[\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}]]$。BCH 公式不依赖伪 Poisson 括号结构,因此可以推得有效保持李群性质的积分。

这种分裂算子 $\boldsymbol{D}_H = \boldsymbol{A} + \boldsymbol{B}$,再合成 $\exp(h\boldsymbol{A})$ 和 $\exp(h\boldsymbol{B})$ 的方法并不容易,因为很难求得精确的 $\exp(h\boldsymbol{A})$ 和 $\exp(h\boldsymbol{B})$。对于本节

讨论的自治系统，第二章的李级数解法是一个李群积分法，它给出 $\exp(h\boldsymbol{A})$ 和 $\exp(h\boldsymbol{B})$ 属于原系统的李群的显式近似。将对称合成积分方法及相同精度的李级数解法同时用于带耗散的广义 Hamilton 系统式(3.110)，可以得到显式的李群积分方法。顺便指出，属于原李代数的算子 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 应尽可能简单。

而且，构造四阶积分法，应取不低于四阶的李级数解近似 $\exp(h\boldsymbol{A})$ 和 $\exp(h\boldsymbol{B})$，即

$$\left.\begin{aligned}\exp(h\boldsymbol{A}) &= \boldsymbol{I}+h\boldsymbol{A}+\frac{h^2}{2}\boldsymbol{A}^2+\cdots+\frac{h^m}{m!}\boldsymbol{A}^m+O(h^{m+1})\\ \exp(h\boldsymbol{B}) &= \boldsymbol{I}+h\boldsymbol{B}+\frac{h^2}{2}\boldsymbol{B}^2+\cdots+\frac{h^m}{m!}\boldsymbol{B}^m+O(h^{m+1})\end{aligned}\right\} \tag{3.116}$$

其中，$m\geqslant 4$。而后，由四阶对称合成积分法式(3.113)可近似求得 $\exp(h\boldsymbol{D}_H)$。即交替使用式(3.113)和式(3.116)的近似公式，便可得求解方程式(3.110)的近似格式，即

$$\begin{aligned}\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{\Psi}(\boldsymbol{x}_k,h)\boldsymbol{x}_k = \exp(h\boldsymbol{D}_H)\boldsymbol{x}_k = \\ \left(\prod_{i=1}^{4}\exp(c_ih\boldsymbol{A})\exp(d_ih\boldsymbol{B})\right)\boldsymbol{x}_k\end{aligned} \tag{3.117}$$

式中，$c_i, d_i, i=1,\cdots,4$ 与式(3.114)中的相应参数相同，$\boldsymbol{x}_k = \boldsymbol{x}(kh), k=0,1,2,\cdots, \boldsymbol{D}_H = \boldsymbol{D}_H(\boldsymbol{x}_k), \boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}_k)$，等等。

3.5.3 数值方法在广义 Hamilton 控制系统的应用

带耗散的广义 Hamilton 控制系统模型如下：

$$\left.\begin{aligned}\dot{\boldsymbol{x}} &= \boldsymbol{M}(\boldsymbol{x})\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{x}}(\boldsymbol{x})+\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{u}\\ \boldsymbol{y} &= \boldsymbol{g}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x})\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{x}}(\boldsymbol{x})\end{aligned}\right\} \tag{3.118}$$

它又可以写为

$$\begin{bmatrix}\dot{\boldsymbol{x}}\\ \dot{\boldsymbol{\eta}}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{M}(\boldsymbol{x}) & -\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x})\\ \boldsymbol{g}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x}) & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\dfrac{\partial H_a}{\partial \boldsymbol{x}}\\ \dfrac{\partial H_a}{\partial \boldsymbol{\eta}}\end{bmatrix} \tag{3.119}$$

式中

$$H_\alpha(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\eta}) = H(\boldsymbol{x}) + H_s(\boldsymbol{\eta})$$

$$H_s(\boldsymbol{\eta}) = -\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\eta}$$

$$\dot{\boldsymbol{\eta}} = \boldsymbol{y}$$

因此，本书中讲述的积分方法完全适用。

3.5.4 算例

【例 3.2】 求解非线性 Hamilton 系统初值问题：

$$\begin{cases} \dot{x}_1 = x_2 \\ \dot{x}_2 = x_1 + x_1^2 \\ x_1(0) = -1.2,\ x_2(0) = 0 \end{cases}$$

式中，Hamilton 函数为 $H(x_1,x_2) = -\frac{1}{2}x_1^2 + \frac{1}{2}x_2^2 - \frac{1}{3}x_1^3$，$-x_1^2 + x_2^2 - \frac{2}{3}x_1^3 = -0.288$ 是它的解曲线，取步长 $h=0.1$，采用四阶近似格式计算，其相轨迹误差 $\Delta Orb = -\tilde{x}_1^2 + \tilde{x}_2^2 - \frac{2}{3}\tilde{x}_1^3 + 0.288$，如图 3.4 所示，其中 $\tilde{x}_1$，$\tilde{x}_2$ 是数值解。图 3.5 给出了 Hamilton 函数的误差，它们都达到了六阶精度。

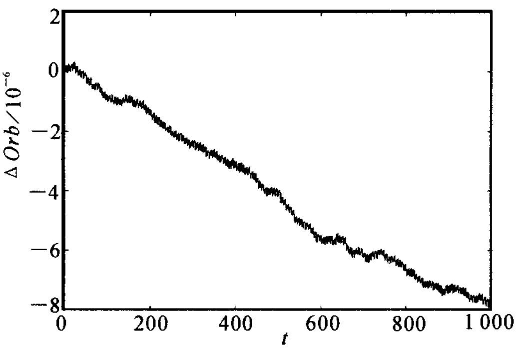


图 3.4 相轨迹的误差

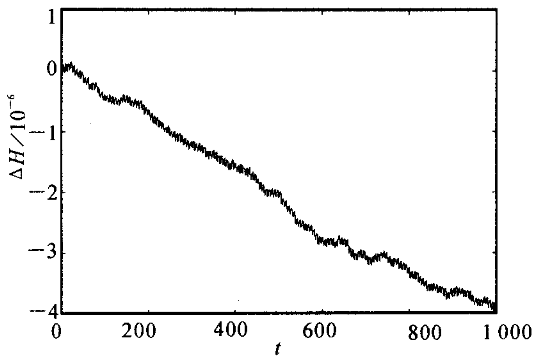


图 3.5 Hamilton 函数的误差

3.6 广义Hamilton(控制)系统的离散梯度积分法

3.6.1 系统模型

1. 广义 Hamilton 系统模型

广义 Hamilton 系统模型为式(3.110)。我们知道，一个有定常秩的矩阵可以惟一地分解为

$$\boldsymbol{M}(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x})-\boldsymbol{R}(\boldsymbol{x})+\boldsymbol{S}(\boldsymbol{x}) \tag{3.120}$$

式中，$\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x})$ 是反对称矩阵，$\boldsymbol{R}(\boldsymbol{x})\geqslant 0$ 和 $\boldsymbol{S}(\boldsymbol{x})\geqslant 0$ 为对称半正定矩阵，其秩分别为 $\boldsymbol{M}+\boldsymbol{M}^{\mathrm{T}}$ 的负、正特征根数。将其代入式(3.110) 并考虑系统的 Hamilton 函数的变化率，则有

$$\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}t}=-\left(\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{x}}\right)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R}(\boldsymbol{x})\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{x}}+\left(\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{x}}\right)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{S}(\boldsymbol{x})\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{x}} \tag{3.121}$$

实际上，Hamilton 函数是基于能量构造的，所以式(3.121) 又称为系统的能量变化率，其中，第一项为耗散，第二项表示内部能量源产生的能量。

2. 广义 Hamilton 控制系统模型

广义 Hamilton控制系统模型为式(3.118)，化为式(3.119)形式后属于“线性梯度形式”。控制系统的能量变化率为

$$\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}t}=-\left(\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{x}}\right)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R}(\boldsymbol{x})\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{x}}+\left(\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{x}}\right)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{S}(\boldsymbol{x})\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{x}}+\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \tag{3.122}$$

式(3.122) 等号右边第一项为耗散，第二项为内部能量源产生的能量，增加的第三项表示外部能量供给。

3.6.2　离散梯度及离散梯度积分法

1. 离散梯度的定义

定义 3.11[18]　设 H 是一个可微函数，如果它是连续的，且满足

$$\left.\begin{aligned}&\frac{\Delta H}{\Delta \boldsymbol{x}}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')\cdot(\boldsymbol{x}'-\boldsymbol{x})=H(\boldsymbol{x}')-H(\boldsymbol{x})\\&\frac{\Delta H}{\Delta \boldsymbol{x}}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x})=\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{x}}(\boldsymbol{x})\end{aligned}\right\} \tag{3.123}$$

则 $\frac{\Delta H}{\Delta \boldsymbol{x}}$ 称为 H 的一个离散梯度。

2. 梯度的离散方法

取 h 为离散时间的步长，由式(3.123) 可见，$\frac{\Delta H}{\Delta \boldsymbol{x}}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')=\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{x}}(\boldsymbol{x})+O(h)$。最简单的离散方法是沿各个坐标轴进行离散，即

$$\left(\frac{\Delta H}{\Delta \boldsymbol{x}}\right)_1(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')=\begin{bmatrix}\dfrac{H(x_1',x_2,x_3,\cdots,x_n)-H(x_1,x_2,x_3,\cdots,x_n)}{x_1'-x_1}\\\dfrac{H(x_1',x_2',x_3,\cdots,x_n)-H(x_1',x_2,x_3,\cdots,x_n)}{x_2'-x_2}\\\vdots\\\dfrac{H(x_1',\cdots,x_{n-2}',x_{n-1}',x_n)-H(x_1',\cdots,x_{n-2}',x_{n-1},x_n)}{x_{n-1}'-x_{n-1}}\\\dfrac{H(x_1',\cdots,x_{n-2}',x_{n-1}',x_n')-H(x_1',\cdots,x_{n-2}',x_{n-1}',x_n)}{x_n'-x_n}\end{bmatrix} \tag{3.124}$$

式中，$\frac{0}{0}$ 可理解为$\frac{\partial H}{\partial x_i}(x)$。$\left(\frac{\Delta H}{\Delta \boldsymbol{x}}\right)_1$ 是 H 的梯度的一阶近似。

平均离散梯度[23] 为

$$\left(\frac{\Delta H}{\Delta \boldsymbol{x}}\right)_2(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}') = \int_0^1 \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{x}}((1-\xi)\boldsymbol{x}+\xi\boldsymbol{x}')\mathrm{d}\xi \quad (\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{x}') \tag{3.125}$$

是二阶离散形式，它是$[\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}']$上 H 的梯度平均值。

另外，

$$\left(\frac{\Delta H}{\Delta \boldsymbol{x}}\right)_3(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}') = \frac{(\Delta H/\Delta \boldsymbol{x})_1(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}') + (\Delta H/\Delta \boldsymbol{x})_1(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{x})}{2} \tag{3.126}$$

也是 H 的梯度的一个二阶近似，且它是对称格式。

任意离散梯度可以由其中一个离散梯度形式加上如下(齐次)方程组的解获得：

$$(\boldsymbol{x}'-\boldsymbol{x})\cdot \boldsymbol{a}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}') = 0, \quad \boldsymbol{a}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}') = O(\tau) \tag{3.127}$$

式(3.127)的解为

$$\boldsymbol{a}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}') = \boldsymbol{b}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}') - (\boldsymbol{x}'-\boldsymbol{x})\frac{(\boldsymbol{x}'-\boldsymbol{x})\cdot \boldsymbol{b}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')}{(\boldsymbol{x}'-\boldsymbol{x})\cdot(\boldsymbol{x}'-\boldsymbol{x})} \tag{3.128}$$

式中，$\boldsymbol{b}$ 是任意的一阶矢量。文献[18]中取为

$$\boldsymbol{b}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}') = \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{x}}(\boldsymbol{z}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')) - \left(\frac{\Delta H}{\Delta \boldsymbol{x}}\right)_1(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}') \tag{3.129}$$

则有

$$\left(\frac{\Delta H}{\Delta \boldsymbol{x}}\right)_4(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}') = \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{x}}(\boldsymbol{z}) - (\boldsymbol{x}'-\boldsymbol{x})\frac{(\boldsymbol{x}'-\boldsymbol{x})\cdot\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{x}}(\boldsymbol{z}) - H(\boldsymbol{x}') + H(\boldsymbol{x})}{(\boldsymbol{x}'-\boldsymbol{x})\cdot(\boldsymbol{x}'-\boldsymbol{x})} \tag{3.130}$$

式中，$\boldsymbol{z}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}') = \boldsymbol{x} + O(h)$，则式(3.130)是 H 的梯度的一个二阶近似。

3. 离散梯度积分法

对于广义 Hamilton 系统式(3.110)，记 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}(kh)$，$\boldsymbol{x}'=\boldsymbol{x}[(k+1)h]$，$k=0,1,2,\cdots$，最简单的一阶积分格式为

$$\frac{\boldsymbol{x}'-\boldsymbol{x}}{h}=\overline{\boldsymbol{M}}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}',h)\left(\frac{\Delta H}{\Delta\boldsymbol{x}}\right)_1(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}') \tag{3.131}$$

式中，$\overline{\boldsymbol{M}}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}',h)=\boldsymbol{M}(\boldsymbol{x})+O(h)$ 是 $\boldsymbol{M}$ 的一个近似。

另外，若要求积分格式具有时间对称性，则可以获得二阶积分。即要求

$$\overline{\boldsymbol{M}}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}',h)=\overline{\boldsymbol{M}}(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{x},-h) \tag{3.132}$$

$$\left(\frac{\Delta H}{\Delta\boldsymbol{x}}\right)(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')=\left(\frac{\Delta H}{\Delta\boldsymbol{x}}\right)(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{x}) \tag{3.133}$$

$\overline{\boldsymbol{M}}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}',h)=\boldsymbol{M}\left(\frac{\boldsymbol{x}+\boldsymbol{x}'}{2}\right)$满足式(3.132)，$\left(\frac{\Delta H}{\Delta\boldsymbol{x}}\right)_3$ 及 $\left(\frac{\Delta H}{\Delta\boldsymbol{x}}\right)_4$（满足 $\boldsymbol{z}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')=\boldsymbol{z}(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{x})$ 时）可使得式(3.133)成立。于是，得到二阶积分格式为

$$\frac{\boldsymbol{x}'-\boldsymbol{x}}{h}=\boldsymbol{M}\left(\frac{\boldsymbol{x}+\boldsymbol{x}'}{2}\right)\left(\frac{\Delta H}{\Delta\boldsymbol{x}}\right)_3(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}') \tag{3.134}$$

或

$$\frac{\boldsymbol{x}'-\boldsymbol{x}}{h}=\boldsymbol{M}\left(\frac{\boldsymbol{x}+\boldsymbol{x}'}{2}\right)\left(\frac{\Delta H}{\Delta\boldsymbol{x}}\right)_4(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}') \tag{3.135}$$

式中，$\left(\frac{\Delta H}{\Delta\boldsymbol{x}}\right)_4$ 所含的 $\boldsymbol{z}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')=\frac{\boldsymbol{x}+\boldsymbol{x}'}{2}$。

对于广义 Hamilton 控制系统式(3.118)，变换为式(3.119)的“线性梯度”形式后，上述积分方法完全相同。

时间对称格式式(3.134)和式(3.135)使得积分方法可以通过 Yoshida[13] 的对称合成技术构造高阶的积分格式。

离散梯度积分法能保持系统 Hamilton 函数的固有性质。如果 $\boldsymbol{M}$ 是对称的，则广义 Hamilton 系统式(3.110)就是一个 Hamilton 系统，此时，Hamilton 函数 H 是守恒的。如果 $\boldsymbol{M}$ 是任意矩阵，离散梯度积分法依然能近似保持原 Hamilton 函数 H 随时间的变化率。

命题 3.3 广义 Hamilton(控制) 系统的离散梯度积分法近似保持其 Hamilton 函数随时间的变化率，逼近程度与积分方法的精度相同。

证明 对于广义 Hamilton 系统式(3.110)，离散的 Hamilton 函数的变化率为

$$\frac{\Delta H}{\Delta t}=\left(\frac{\Delta H}{\Delta \boldsymbol{x}}\right)^{\mathrm{T}}\dot{\boldsymbol{x}}=\left(\frac{\Delta H}{\Delta \boldsymbol{x}}\right)^{\mathrm{T}}\overline{\boldsymbol{M}}(\boldsymbol{x})\left(\frac{\Delta H}{\Delta \boldsymbol{x}}\right)=$$
$$\left(\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{x}}+O(h)\right)^{\mathrm{T}}[\boldsymbol{M}(\boldsymbol{x})+O(h)]\left(\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{x}}+O(h)\right)=$$
$$\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}t}+O(h) \tag{3.136}$$

由式(3.136) 可见，离散梯度积分法保持 Hamilton 函数的变化率达到算法的计算精度。

对广义 Hamilton 控制系统式(3.118)，把它写成式(3.119) 的"线性梯度"形式后，通过离散式(3.119) 的扩张 Hamilton 函数的梯度$\frac{\partial H_\alpha}{\partial \boldsymbol{x}}$，便可获得式(3.118) 的数值解。不难看出，离散$\frac{\partial H_\alpha}{\partial \boldsymbol{x}}$包含了独立离散$\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{x}}$的过程，且有

$$\frac{\boldsymbol{x}'-\boldsymbol{x}}{h}\approx\overline{\boldsymbol{M}}\,\frac{\Delta H}{\Delta \boldsymbol{x}}+\bar{\boldsymbol{g}}\,\bar{\boldsymbol{u}} \tag{3.137}$$

式中，$\overline{\boldsymbol{M}}$，$\bar{\boldsymbol{g}}$ 及 $\bar{\boldsymbol{u}}$ 分别是 $\boldsymbol{M}$，$\boldsymbol{g}$ 及 $\boldsymbol{u}$ 的近似值。其离散的 Hamilton 函数的变化率为

$$\frac{\Delta H}{\Delta t}=\left(\frac{\Delta H}{\Delta \boldsymbol{x}}\right)^{\mathrm{T}}\dot{\boldsymbol{x}}=\left(\frac{\Delta H}{\Delta \boldsymbol{x}}\right)^{\mathrm{T}}\overline{\boldsymbol{M}}(\boldsymbol{x})\left(\frac{\Delta H}{\Delta \boldsymbol{x}}\right)+\left(\frac{\Delta H}{\Delta \boldsymbol{x}}\right)^{\mathrm{T}}\bar{\boldsymbol{g}}\,\bar{\boldsymbol{u}}=$$
$$\left(\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{x}}+O(h)\right)^{\mathrm{T}}[\boldsymbol{M}(\boldsymbol{x})+O(h)]\left(\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{x}}+O(h)\right)+$$
$$(\boldsymbol{u}+O(h))^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{g}+O(h))^{\mathrm{T}}\left(\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{x}}+O(h)\right)\approx$$
$$\left(\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{x}}\right)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{M}(\boldsymbol{x})\,\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{x}}+\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}=\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}t} \tag{3.138}$$

由此可见，离散梯度积分法保证了 Hamilton 函数随时间的变化率的近似程度与算法精度相同。

3.6.3　算例

【例 3.3】　考虑受迫 Duffing 方程：

$$\begin{cases}\dot{x}_1 = x_2 \\ \dot{x}_2 = -\gamma x_2 - \alpha x_1 - \beta x_1^3 + f_0\cos(\omega t)\end{cases}$$

式中，α，β 和 γ 是物理参数，f_0 是频率为 ω 的外力的振幅。取 $\alpha = -1$，$\beta = 1$，$\omega = 1.2$ 和 $f_0 = 0.2$，取 $\gamma = 0$ 及 0.3。当 $\gamma = 0$ 时系统内部没有能量源，也没有能量耗散，只有外部激励；当 $\gamma = 0.3$ 时系统有能量耗散。

受迫 Duffing 方程可以表示为如下广义 Hamilton 控制系统：

$$\begin{cases}\dot{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{M}(\boldsymbol{x})\dfrac{\partial H}{\partial \boldsymbol{x}}(\boldsymbol{x}) + \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{u} \\ \boldsymbol{y} = \boldsymbol{g}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x})\dfrac{\partial H}{\partial \boldsymbol{x}}(\boldsymbol{x})\end{cases}$$

式中

$$\boldsymbol{M}(\boldsymbol{x}) = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & -0.3 \end{bmatrix},\quad \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{u} = f_0\cos(1.2t),\quad H(\boldsymbol{x}) = -\frac{1}{2}x_1^2 + \frac{1}{4}x_1^4 + \frac{1}{2}x_2^2$$

图 3.6 和图 3.7 分别给出了当 $\gamma = 0$ 及 $\gamma = 0.3$ 时，受迫 Duffing 方程的 Hamilton 函数的“解析”变化率曲线和数值求解的变化率曲线，它们几乎是重合的。其中，$\dfrac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}t}$ 的“分析解”由 $\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$ 的数值结果代入式(3.122)求得；而 $\dfrac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}t}$ 的“数值解”是 Hamilton 函数求差商所得的数值结果。这里采用了二阶离散梯度积分格式（式(3.134)），其中取时间步长为 $h = 0.1$。

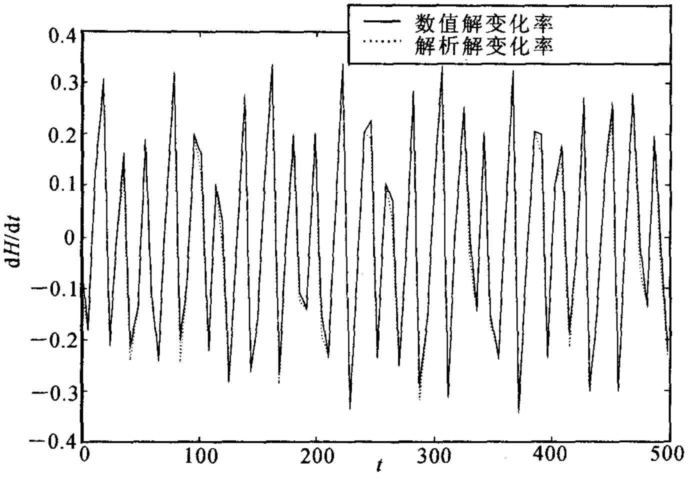


图 3.6 $\gamma=0$ 时$\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}t}$的解析近似变化率和数值近似变化率曲线

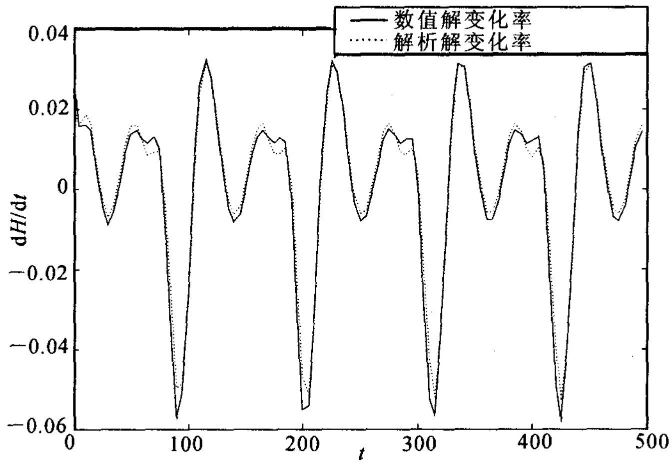


图 3.7 $\gamma=0.3$ 时$\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}t}$的解析近似变化率和数值近似变化率曲线

3.7　非自治耗散广义 Hamilton 系统的解法

前面研究了耗散广义 Hamilton 自治系统的求解方法。对于非自治系统，传统地可以做类似于式(3.24)的处理，将非自治动力学系统转化为自治动力学系统，然后求解。一般说来，这样处理会使原动力学系统的代数结构复杂化。本章基于 Magnus 级数方法及 Fer 展开方法，从另一个角度来求解非自治系统以期得到它的保结构的数值解。

3.7.1　广义 Hamilton 系统的 Fer 展开方法

考虑如下非自治广义 Hamilton 系统[14]：

$$\dot{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{M}(\boldsymbol{x},t)\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{x}} \tag{3.139}$$

式中，H 是 Hamilton 函数，$\boldsymbol{M}$ 是任意的 $n \times n$ 矩阵，其元素是关于 $\boldsymbol{x}$ 和 t 的光滑函数，仍然设其初始条件为 $\boldsymbol{x}(0) = \boldsymbol{x}_0$。

方程式(3.139)可以表示为

$$\dot{\boldsymbol{x}} = \{\boldsymbol{x},H\} \quad 或 \quad \dot{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{d}_H\boldsymbol{x} \tag{3.140}$$

式中，$\{,\}$ 是伪 Poisson 括号，$\boldsymbol{d}_H$ 是一个算子。

$$\boldsymbol{d}_H F = \{F,H\} = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} M_{ij}(\boldsymbol{x},t)\frac{\partial F}{\partial x_i}\frac{\partial H}{\partial x_j} \tag{3.141}$$

这里，$\boldsymbol{M} = \boldsymbol{M}(\boldsymbol{x},t)$ 是伪 Poisson 括号的结构矩阵。方程式(3.139)的解仍然可通过一个映射 $\boldsymbol{\Psi} = \boldsymbol{\Psi}(\boldsymbol{x}_0,t)$ 来获得，也就是 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{\Psi}\boldsymbol{x}_0$，且它应当保持原系统的伪 Poisson 括号的结构，即

$$\boldsymbol{\Psi}\{F,H\} = \{\boldsymbol{\Psi}F,\ \boldsymbol{\Psi}H\} \tag{3.142}$$

如果原动力学系统是自治系统，$\boldsymbol{d}_H$ 不显含时间 t，则从 3.6 节可知映射 $\boldsymbol{\Psi} = \boldsymbol{\Psi}(\boldsymbol{x}_0,t)$ 可写成如下形式：

$$\boldsymbol{\Psi} = \boldsymbol{\Psi}(\boldsymbol{x}_0,t) = \exp(t\boldsymbol{d}_H) = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{t^k}{k!}\boldsymbol{d}_H^k \tag{3.143}$$

对于非自治系统的情形，沿解曲线 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{\Psi x}_0$，对于相空间上任意解析函数 $g(\boldsymbol{x})$，有

$$g(\boldsymbol{x}) = g(\boldsymbol{\Psi x}_0) = \boldsymbol{\Psi} g(\boldsymbol{x}_0) \tag{3.144}$$

也就是说，映射 $\boldsymbol{\Psi} = \boldsymbol{\Psi}(\boldsymbol{x}_0, t)$ 作用在 $\boldsymbol{x}_0$ 的函数 g，该函数随时间依运动方程式(3.140)而变化。对式(3.144)两边取导数，可得

$$\dot{g}(\boldsymbol{x}) = \dot{\boldsymbol{\Psi}} g(\boldsymbol{x}_0) \tag{3.145}$$

另一方面，$\dot{g}$ 也可以根据运动方程由伪 Poisson 括号给出，即

$$\dot{g}(\boldsymbol{x}) = \{g(\boldsymbol{x}),\ H(\boldsymbol{x}, t)\} \tag{3.146}$$

又

$$\begin{aligned}\{g(\boldsymbol{x}), H(\boldsymbol{x}, t)\} &= \{g(\boldsymbol{\Psi x}_0),\ H(\boldsymbol{\Psi x}_0, t)\} = \\ &\{\boldsymbol{\Psi} g(\boldsymbol{x}_0),\ \boldsymbol{\Psi} H(\boldsymbol{x}_0, t)\} = \\ &\boldsymbol{\Psi}\{g(\boldsymbol{x}_0), H(\boldsymbol{x}_0, t)\} = \\ &\boldsymbol{\Psi d}_{H(\boldsymbol{x}_0, t)}\, g(\boldsymbol{x}_0)\end{aligned} \tag{3.147}$$

比较方程式(3.145)，式(3.146)和式(3.147)，即可得到

$$\dot{\boldsymbol{\Psi}} g(\boldsymbol{x}_0) = \boldsymbol{\Psi d}_{H(\boldsymbol{x}_0, t)}\, g(\boldsymbol{x}_0) \tag{3.148}$$

根据函数 g 的任意性，可知 $\boldsymbol{\Psi} = \boldsymbol{\Psi}(\boldsymbol{x}_0, t)$ 满足微分方程

$$\dot{\boldsymbol{\Psi}} = \boldsymbol{\Psi d}_{H(\boldsymbol{x}_0, t)} \tag{3.149}$$

如果$[\boldsymbol{d}_H(\boldsymbol{x}, t),\ \boldsymbol{d}_H(\boldsymbol{x}, s)] = 0$ 对所有的 t 和 s 都成立，那么非自治的算子方程式(3.149)的解为 $\boldsymbol{\Psi} = \exp\left(\int_0^t \boldsymbol{d}_H(\boldsymbol{x}, h)\mathrm{d}s\right)$。显然自治系统属于这种情况。反之，设方程解的形式为

$$\boldsymbol{\Psi} = \boldsymbol{\Psi}_1 \exp(\boldsymbol{D}_H^1),\quad \boldsymbol{\Psi}_1(\boldsymbol{x}_0, 0) = \boldsymbol{I} \tag{3.150}$$

式中，$\boldsymbol{D}_H^1 = \int_0^t \boldsymbol{d}_H(\boldsymbol{x}, s)\mathrm{d}s$。根据文献[24]，有

$$\begin{aligned}&\frac{\partial}{\partial t}\exp(\boldsymbol{D}_H^1) = \int_0^1 \exp(s\boldsymbol{D}_H^1)\dot{\boldsymbol{D}}_H^1 \exp[(1-s)\boldsymbol{D}_H^1]\mathrm{d}s, \\ &\dot{\boldsymbol{D}}_H^1 = \boldsymbol{d}_H\end{aligned} \tag{3.151}$$

再把式(3.150)代入式(3.149)，即得

$$\dot{\boldsymbol{\Psi}} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}[\boldsymbol{\Psi}_1 \exp(\boldsymbol{D}_H^1)] =$$

$$\dot{\boldsymbol{\Psi}}_1\exp(\boldsymbol{D}_H^1)+\boldsymbol{\Psi}_1\int_0^1\exp(s\boldsymbol{D}_H^1)\dot{\boldsymbol{D}}_H^1\exp[(1-s)\boldsymbol{D}_H^1]\mathrm{d}s=$$

$$\boldsymbol{\Psi}_1\exp(\boldsymbol{D}_H^1)\boldsymbol{d}_H \tag{3.152}$$

由式(3.152)中的最后一个等号后的表达式可见，有

$$\dot{\boldsymbol{\Psi}}_1=\boldsymbol{\Psi}_1\exp(\boldsymbol{D}_H^1)\boldsymbol{d}_H\exp[-(\boldsymbol{D}_H^1)]-$$
$$\boldsymbol{\Psi}_1\int_0^1\exp(s\boldsymbol{D}_H^1)\dot{\boldsymbol{D}}_H^1\exp[(1-s)\boldsymbol{D}_H^1]\mathrm{d}s\cdot\exp(-\boldsymbol{D}_H^1)$$

记

$$\boldsymbol{d}_H^1=\exp(\boldsymbol{D}_H^1)\boldsymbol{d}_H\exp[-(\boldsymbol{D}_H^1)]-\int_0^1\exp(s\boldsymbol{D}_H^1)\dot{\boldsymbol{D}}_H^1\exp(-s\boldsymbol{D}_H^1)\mathrm{d}s$$

那么

$$\dot{\boldsymbol{\Psi}}_1=\boldsymbol{\Psi}_1\boldsymbol{d}_H^1 \tag{3.153}$$

重复上面的迭代过程即产生一系列新的算子，n 步以后就是

$$\boldsymbol{\Psi}=\boldsymbol{\Psi}_n\exp(\boldsymbol{D}_H^n)\exp(\boldsymbol{D}_H^{n-1})\cdots\exp(\boldsymbol{D}_H^1) \tag{3.154}$$

$\boldsymbol{\Psi}_n$ 满足如下方程：

$$\frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{\Psi}_n=\boldsymbol{\Psi}_n\boldsymbol{d}_H^n,\quad \boldsymbol{\Psi}_n(\boldsymbol{x}_0,0)=\boldsymbol{I} \tag{3.155}$$

式中

$$\boldsymbol{d}_H^n=\exp(\boldsymbol{D}_H^n)\boldsymbol{d}_H^{n-1}\exp(-\boldsymbol{D}_H^n)-\int_0^1\exp(s\boldsymbol{D}_H^n)\boldsymbol{d}_H^{n-1}\exp(-s\boldsymbol{D}_H^n)\mathrm{d}s \tag{3.156}$$

而

$$\boldsymbol{D}_H^n=\int_0^t\boldsymbol{d}_H^{n-1}(\boldsymbol{x},s)\mathrm{d}s,\quad \boldsymbol{d}_H^0=\boldsymbol{d}_H \tag{3.157}$$

考虑到公式[25]

$$\exp(\boldsymbol{X})\boldsymbol{Y}\exp(-\boldsymbol{X})=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{k!}[\boldsymbol{X}^k,\boldsymbol{Y}] \tag{3.158}$$

这里算子 $\boldsymbol{X}$ 及 $\boldsymbol{Y}$ 的多重交换子的概念同前几节，而$[\boldsymbol{X}^0,\boldsymbol{Y}]=\boldsymbol{Y}$。把式(3.158)代入式(3.156)可得 $\boldsymbol{d}_H^n$ 的另一个表达式，即

$$\boldsymbol{d}_H^n=\sum_{k=1}^{\infty}\frac{k}{(k+1)!}[\boldsymbol{D}_H^k,\ \boldsymbol{d}_H^{n-1}],\ n=1,2,3,\cdots \tag{3.159}$$

迭代 n 步以后，令 $\boldsymbol{\Psi}_n = \boldsymbol{I}, \boldsymbol{\Psi} = \boldsymbol{\Psi}(\boldsymbol{x}_0, t)$ 可近似地表示为

$$\boldsymbol{\Psi} \approx \exp(\boldsymbol{D}_H^n)\exp(\boldsymbol{D}_H^{n-1})\cdots\exp(\boldsymbol{D}_H^1)$$

仍然取时间步长为 h，那么，可得式(3.139)和式(3.140)的 n 阶近似格式为

$$\boldsymbol{x}_{k+1} \approx \exp(\boldsymbol{D}_H^n)\exp(\boldsymbol{D}_H^{n-1})\cdots\exp(\boldsymbol{D}_H^1)\boldsymbol{x}_k,\ k = 0,1,2,\cdots \tag{3.160}$$

这里需要强调两点：一是该算法保持李群性质，这里是保持原系统的伪Poisson括号结构；二是 $\boldsymbol{D}_H^n$ 依时间步长 h 累计达到 h^{2n-1}，如果涉及的取指数可以精确计算，则近似格式的精度为 $h^{2^{n+1}-2}$，所以说该方法是超收敛的。

3.7.2 广义 Hamilton 系统的 Magnus 级数方法

1. 近似方法

Magnus 级数方法常用于求解线性系统：

$$\dot{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{A}(t)\boldsymbol{x}, \quad \boldsymbol{x}(0) = \boldsymbol{x}_0 \tag{3.161}$$

式中，$\boldsymbol{A}(t)$ 是一个 $n\times n$ 的光滑的(复)函数矩阵或线性算子，它能保持精确解的定性性质。线性系统式(3.161)的解可表示为如下形式：

$$\boldsymbol{x}(t) = \exp(\boldsymbol{\Omega}(t))\boldsymbol{x}_0 \tag{3.162}$$

式中，$\boldsymbol{\Omega}(t) = \sum_{k=1}^{\infty}\boldsymbol{\Omega}_k(t)$ 称为 Magnus 级数。它的前两项为

$$\left.\begin{aligned} \boldsymbol{\Omega}_1(t) &= \int_0^t \boldsymbol{A}(s)\mathrm{d}s \\ \boldsymbol{\Omega}_2(t) &= \frac{1}{2}\int_0^t \mathrm{d}s_1\int_0^{s_1}\mathrm{d}s_2[\boldsymbol{A}(s_1), \boldsymbol{A}(s_2)] \end{aligned}\right\} \tag{3.163}$$

这里，$[\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}] = \boldsymbol{AB} - \boldsymbol{BA}$ 是矩阵或线性算子的交换子。采用 Magnus 级数方法可以构造微分方程真解的解析近似，所得近似解限制在真解所在的同一微分流形之上，并能保持真解的许多几

何性质，近些年来它已经成为构造有效数值积分的基础[26~29]。如果 $\boldsymbol{A}(t)$ 是有界的矩阵或算子，对足够小的 t，Magnus 级数是绝对收敛的[26]，并且能给出非常精确的近似解，甚至适当截取前几项就能得到非常精确的近似解。和 3.7.1 节的 Fer 展开方法一样，该级数的主要问题也是计算多重积分。根据配置原理，可以应用标准的一元积分公式来计算多重积分[28]。例如采用高斯-拉盖尔积分公式。为了提高效率和简化方法，采用一元积分表示 Magnus 级数的各项[27]。记 $\boldsymbol{A}^{(i)}$，$i=0,1$，是关于 $\boldsymbol{A}(t)$ 的如下积分：

$$\boldsymbol{A}^{(i)} = \frac{1}{h^i}\int_{-h/2}^{h/2} t^i \boldsymbol{A}\left(t+\frac{h}{2}\right)\mathrm{d}t,\ i=0,1 \tag{3.164}$$

用不同的积分公式近似计算上式中的积分可以得到不同的算法，我们采用四阶的高斯-拉盖尔积分公式来计算式(3.164)，即

$$\begin{aligned}\boldsymbol{A}^{(0)} &= \frac{h}{2}(\boldsymbol{A}_1+\boldsymbol{A}_2)+O(h^5)\\ \boldsymbol{A}^{(1)} &= \frac{\sqrt{3}h}{12}(\boldsymbol{A}_2-\boldsymbol{A}_1)+O(h^5)\end{aligned} \tag{3.165}$$

式中，$\boldsymbol{A}_i=\boldsymbol{A}(c_ih)$，$i=1,2$，$c_{1,2}=\dfrac{1}{2}\mp\dfrac{\sqrt{3}}{6}$。

那么，在一个时间步长范围内 $\boldsymbol{\Omega}(h)$ 有两个四阶近似表达式，即

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\Omega}(h) = \boldsymbol{\Omega}_1(h)+\boldsymbol{\Omega}_2(h)+O(h^5) =\\ \boldsymbol{A}^{(0)}+(\boldsymbol{A}^{(1)},\boldsymbol{A}^{(0)})+O(h^5)\end{aligned} \tag{3.166}$$

对于 3.7.1 节推得的广义 Hamilton 系统微分方程的解算子应满足的微分方程(3.149)，这里采用 Magnus 级数方法，根据式(3.166) 可得解算子 $\boldsymbol{\Psi}=\boldsymbol{\Psi}(\boldsymbol{x}_0,h)$ 的四阶近似表达式为

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\Psi} = \boldsymbol{\Psi}(\boldsymbol{x}_0,h) = \exp(\hat{\boldsymbol{\Omega}}_1(h)+\hat{\boldsymbol{\Omega}}_2(h))+O(h^5) =\\ \exp(\boldsymbol{d}^{(0)}+(\boldsymbol{d}^{(0)},\boldsymbol{d}^{(1)}))+O(h^5)\end{aligned} \tag{3.167}$$

式中

$$\hat{\boldsymbol{\Omega}}_1(h)=\int_0^h \boldsymbol{d}_{H(\boldsymbol{x}_0,s)}\,\mathrm{d}s \tag{3.168}$$

$$\hat{\boldsymbol{\Omega}}_2(h)=-\frac{1}{2}\int_0^h \mathrm{d}s_1\int_0^{s_1}\mathrm{d}s_2\,(\boldsymbol{d}_{H(\boldsymbol{x}_0,s_1)},\ \boldsymbol{d}_{H(\boldsymbol{x}_0,s_2)}) \tag{3.169}$$

$$\begin{aligned}\boldsymbol{d}^{(0)}&=\frac{h}{2}(\boldsymbol{d}_1+\boldsymbol{d}_2)+O(h^5)\\ \boldsymbol{d}^{(1)}&=\frac{\sqrt{3}h}{12}(\boldsymbol{d}_2-\boldsymbol{d}_1)+O(h^5)\end{aligned} \tag{3.170}$$

式中，$\boldsymbol{d}_i=\boldsymbol{d}_{H(\boldsymbol{x}_0,c_ih)}$，$i=1,2$，$c_{1,2}=\frac{1}{2}\mp\frac{\sqrt{3}}{6}$。注意，因为式(3.149)中算子 $\boldsymbol{d}_{H(\boldsymbol{x}_0,t)}$ 在所求 $\boldsymbol{\Psi}$ 的表达式等号的右边，与式(3.163)中 $\boldsymbol{\Omega}_2$ 相比，$\hat{\boldsymbol{\Omega}}_2(h)$ 的符号变了。

为了避免计算交换子，这里给出下述命题。

命题 3.4 设时间步长为 h，由式(3.170)定义的 $\boldsymbol{d}^{(0)}$，$\boldsymbol{d}^{(1)}$ 可得算子微分方程式(3.149)的解算子有如下四阶近似格式：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\Psi}(\boldsymbol{x}_0,h)&=\exp\boldsymbol{\Omega}(h)=\\ &\exp\left(\frac{1}{2}\boldsymbol{d}^{(0)}-2\boldsymbol{d}^{(1)}\right)\exp\left(\frac{1}{2}\boldsymbol{d}^{(0)}+2\boldsymbol{d}^{(1)}\right)+O(h^5)=\\ &\exp(-\boldsymbol{d}^{(1)})\exp(\boldsymbol{d}^{(0)})\exp(\boldsymbol{d}^{(1)})+O(h^5)\end{aligned} \tag{3.171}$$

式中，$\boldsymbol{d}^{(i)}=\boldsymbol{d}^{(i)}(\boldsymbol{x}_0,h)$，$i=0,1$。

证明 由式(3.164)可见，$\boldsymbol{d}^{(0)}(\boldsymbol{x}_0,h)=O(h)$，$\boldsymbol{d}^{(1)}(\boldsymbol{x}_0,h)=O(h^2)$。根据 BCH 公式，有

$$\begin{aligned}\exp(\boldsymbol{X})\exp(\boldsymbol{Y})&=\exp\Big(\boldsymbol{X}+\boldsymbol{Y}+\frac{1}{2}[\boldsymbol{X},\boldsymbol{Y}]+\\ &\qquad\frac{1}{12}([\boldsymbol{X},[\boldsymbol{X},\boldsymbol{Y}]]+[\boldsymbol{Y},[\boldsymbol{Y},\boldsymbol{X}]])+\cdots\Big)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}&\exp(\boldsymbol{X})\exp(\boldsymbol{Y})\exp(-\boldsymbol{X})=\\ &\qquad\exp\Big(\boldsymbol{Y}+[\boldsymbol{X},\boldsymbol{Y}]+\frac{1}{2}[\boldsymbol{X},[\boldsymbol{X},\boldsymbol{Y}]]+\cdots\Big)\end{aligned}$$

显然式(3.171) 同式(3.167) 一样,都是真解的四阶近似。

那么,对于非线性方程式(3.139) 及式(3.140) 有如下的四阶近似格式:

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{x}_{k+1} &= \exp\boldsymbol{\Omega}(h)\boldsymbol{x}_k = \\
&\exp\left(\frac{1}{2}\boldsymbol{d}^{(0)} - 2\boldsymbol{d}^{(1)}\right)\exp\left(\frac{1}{2}\boldsymbol{d}^{(0)} + 2\boldsymbol{d}^{(1)}\right)\boldsymbol{x}_k + O(h^5) = \\
&\exp(-\boldsymbol{d}^{(1)})\exp(\boldsymbol{d}^{(0)})\exp(\boldsymbol{d}^{(1)})\boldsymbol{x}_k + O(h^5) \qquad (3.172)
\end{aligned}
$$

式中,$\boldsymbol{d}^{(i)} = \boldsymbol{d}^{(i)}(\boldsymbol{x}_k, h)$, $i = 0,1$;$\boldsymbol{x}_k = \boldsymbol{x}(kh)$, $k = 0,1,2,\cdots$。应当指出,对于非自治广义 Hamilton 控制系统,上述算法同样适用。

2. 近似方法的时间对称性

定义 3.12 如果数值方法 $\boldsymbol{x}_h = \boldsymbol{\Psi}(\boldsymbol{x}_0, h, t_0)$ 满足 $\boldsymbol{x}_0 = \boldsymbol{\Psi}(\boldsymbol{x}_h, -h, t_0 + h)$,则称该方法是时间对称的。

命题 3.5 四阶近似格式式(3.172) 保持真解的时间对称性。

证明 不妨考虑式(3.172) 的第二个近似格式。由式(3.164) 及式(3.170) 知,$\boldsymbol{d}^{(0)}(\boldsymbol{x}_0, -h) = -\boldsymbol{d}^{(0)}(\boldsymbol{x}_0, h)$, $\boldsymbol{d}^{(1)}(\boldsymbol{x}_0, -h) = \boldsymbol{d}^{(1)}(\boldsymbol{x}_0, h)$,记

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{x}_h &= \exp(-\boldsymbol{d}^{(1)}(\boldsymbol{x}_0, h))\exp(\boldsymbol{d}^{(0)}(\boldsymbol{x}_0, h)) \\
&\quad \exp(\boldsymbol{d}^{(1)}(\boldsymbol{x}_0, h))\boldsymbol{x}_0 = \boldsymbol{\Psi}_1(\boldsymbol{x}_0) \qquad (3.173)
\end{aligned}
$$

根据时间对称性的定义,需要证明用同样的方法以 $-h$ 为步长由 $\boldsymbol{x}_h$ 可以返回到初始点 $\boldsymbol{x}_0$,即

$$
\begin{aligned}
&\boldsymbol{\Psi}(\boldsymbol{x}_h, -h, t_0 + h) = \\
&\quad \exp(-\boldsymbol{d}^{(1)}(\boldsymbol{x}_0, -h))\exp(\boldsymbol{d}^{(0)}(\boldsymbol{x}_0, -h)) \\
&\quad \exp(\boldsymbol{d}^{(1)}(\boldsymbol{x}_0, -h))\boldsymbol{x}_n = \\
&\quad \exp(-\boldsymbol{d}^{(1)}(\boldsymbol{x}_0, h))\exp(-\boldsymbol{d}^{(0)}(\boldsymbol{x}_0, h)) \\
&\quad \exp(\boldsymbol{d}^{(1)}(\boldsymbol{x}_0, h))\boldsymbol{x}_h = \boldsymbol{\Psi}_2(\boldsymbol{x}_h) \qquad (3.174)
\end{aligned}
$$

应用式(3.173),并且注意算子的作用方式,不难推导:

$$
\begin{aligned}
&\boldsymbol{\Psi}(\boldsymbol{x}_h, -h, t_0 + h) = \boldsymbol{\Psi}_2(\boldsymbol{x}_h) = \\
&\quad \exp(-\boldsymbol{d}^{(1)}(\boldsymbol{x}_0, h))\exp(\boldsymbol{d}^{(0)}(\boldsymbol{x}_0, h))
\end{aligned}
$$

$$\exp(\boldsymbol{d}^{(1)}(\boldsymbol{x}_0,h))\boldsymbol{\Psi}_2(\boldsymbol{x}_0) =$$
$$\exp(-\boldsymbol{d}^{(1)})\exp(\boldsymbol{d}^{(0)})\exp(\boldsymbol{d}^{(1)})$$
$$\exp(-\boldsymbol{d}^{(1)})\exp(-\boldsymbol{d}^{(0)})\exp(\boldsymbol{d}^{(1)})\boldsymbol{x}_0 = \boldsymbol{x}_0 \quad (3.175)$$

同理可证明式(3.172)的第一个近似格式。

3.7.3 算例

【例 3.4】 为实验文中数值方法，仍然考虑如下受迫 Duffing 方程：

$$\begin{cases}\dot{x}_1 = x_2 \\ \dot{x}_2 = -\gamma x_2 - \alpha x_1 - \beta x_1^3 + f_0\cos(\omega t)\end{cases}$$

式中，α，β 和 γ 是物理参数；f_0 是频率为 ω 的外力的振幅。取 $\alpha = -1$，$\beta = 1$，$\gamma = 0.3$ 和 $\omega = 1.2$，外力的振幅分别取为 $f_0 = 0.2$，0.27，0.286 7 和 0.32。采用二阶 Fer 型积分格式计算，由图 3.8 至图 3.11 所示的数值结果可见，它们分别是 1-周期，2-周期，4-周期的响应和混沌响应，图中没有画始于初始点 $x_1 = 2$ 和 $x_2 = 0$ 的暂态轨线部分。

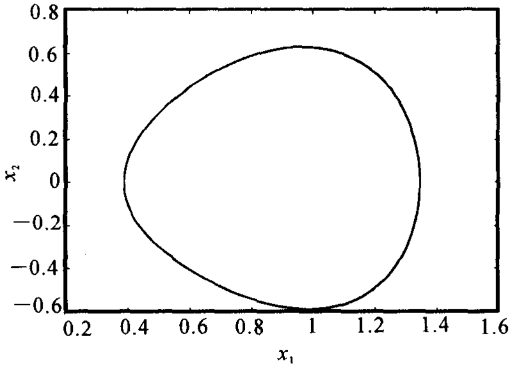


图 3.8 $f_0 = 0.2$ 时呈现的 1-周期响应

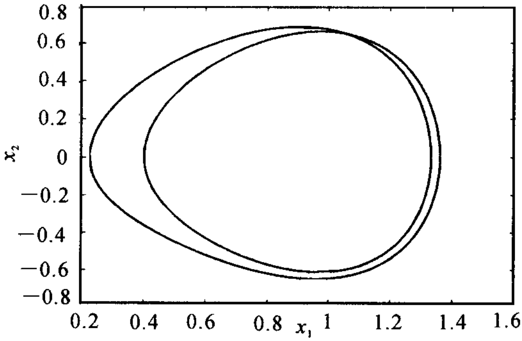


图 3.9　$f_0=0.27$ 时呈现的 2-周期响应

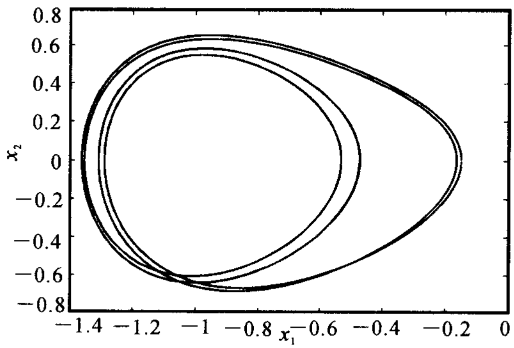


图 3.10　$f_0=0.286\ 7$ 时呈现的 4-周期响应

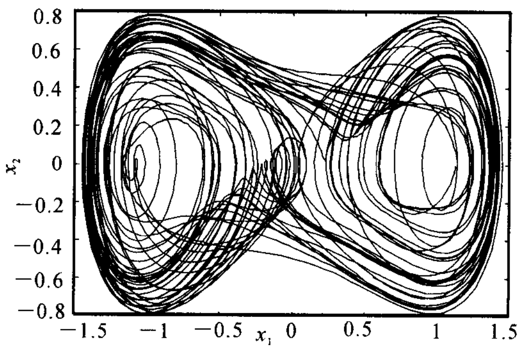


图 3.11　$f_0=0.32$ 时出现的混沌

3.8 本章小结

本章研究了广义 Hamilton 系统及广义 Hamilton 控制系统的李群积分法。在守恒系统解析解的理论基础上给出了构造守恒广义 Hamilton 系统的任意高阶的显式积分格式的方法，同时讨论了算法的具体实施过程。对带耗散的广义 Hamilton 系统，用不同的方法求解自治与非自治系统。对自治系统，将其分裂成尽可能简单的两个子问题，分别求解两个子问题而后合成它们的解即可得到所求原广义 Hamilton 自治系统的近似解。也就是说，用微分算子的形式描述方程，把原微分算子分裂成尽可能简单的两部分 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$，要求 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 均属于原李代数。已分裂的算子取指数后，合成其指数近似（即 $\exp(t\boldsymbol{A})$ 和 $\exp(t\boldsymbol{B})$ 的近似）就可得到所求的原系统的近似解 $\exp(t\boldsymbol{D}_H)$，其中取指数的计算精度应等于或高于合成近似方法的计算精度。该方法保持了原系统真解的典则性，因而是稳定的。有时我们更关注系统的能量函数性质，如 Hamilton 函数性质，本章用离散梯度的方法给出了广义 Hamilton 系统及广义 Hamilton 控制系统的保持其 Hamilton 函数性质特征不变的数值解法。对于非自治广义 Hamilton 系统及广义 Hamilton 控制系统，基于经典的求解线性系统的 Magnus 级数方法和 Fer 展开式的几何积分思想，分别推导出了关于时间对称的简便易行的四阶 Magnus 级数方法和超收敛的 $n(n\geqslant 2)$ 阶 Fer 展开方法，它们都保持耗散广义 Hamilton 系统的广义伪 Poisson 括号结构不变，属于几何积分方法。

参考文献

1 Sanz-Serna J M. Symplectic integrators for Hamiltonian problems: An overview, Acta. Numerica, 1992, 1: 243 ～ 286

2 Feng K. On difference schemes and symplectic geometry. Proc. 1984 Beijing Int. Symp. On differential geometry and differential equation-computation of partial differential equations, ed. Feng Kang, Beijing: Science Press, 1985

3 李继彬,赵晓华,刘正荣. 广义哈密顿理论及其应用. 北京:科学出版社, 1999

4 Iserles A, Zanna A. Qualitative numerical analysis of ODEs. Damtp Tech. Rep. , Cambridge University

5 Stuart A M. Numerical analysis of dynamical systems. Acta Numerica, ed. Iserles A, 1994

6 Sanz-Serna J M, Calvo M P. Numerical Hamiltonian problems. Cambridge: Chapman and Hall

7 Candy J, Rozmus W. A symplectic integration algorithm for separable Hamiltonian functions. J. Comput. Phys. 1991, 92: 230 ~ 256

8 Forest E, Ruth R D. Fourth-order symplectic integration. Phys. D, 1990, 43:105 ~ 117

9 张素英,邓子辰. Poisson 流形上广义 Hamilton 系统的保结构算法. 西北工业大学学报,2002, 20(4): 625 ~ 628

10 Maschke B M J, Ortega R, van der Schaft A J. Energy-based Lyapunov Functions for Forced Hamiltonian Systems with Dissipation. In: Proc of CDC98, 1998. 3599 ~ 3604

11 Forest E, Ruth R D. Fourth-order symplectic integration. Physica D, 1990, 43: 105 ~ 117

12 Forest E. Sixth-order Lie group integrators. J. of Comp. Phys. , 1992, 99: 209 ~ 213

13 Yoshida H. Construction of higher order symplectic integrators. Physics Letters A, 1990, 150: 262 ~ 268

14 程代展,卢强. 广义 Hamilton 控制系统的几何结构及其应用. 中国科学 (E 辑), 2000, 30(4): 341 ~ 355

15 朱位秋,黄志龙. 随机激励的耗散的 Hamilton 体系理论的研究进展. 力学进展,2000, 30(4): 481 ~ 494

16 McLachlan R I. On the numerical integrationof ordinary differential equations by symmetric composition methods. SIAM J. Sci. Comput., 1995, 16: 151 ~ 168

17 Feng K, Wang D L. Dynamical systems and geometric construction of algorithms. Contemporary Mathematics 163. ed. Z. Shi and C. Yang

18 Gonzalez O. Time integration and discrete Hamiltonian systems. J. Nonlinear Sci. 1994, 6:449 ~ 467

19 Quispel G R W, Capel H W. Solving ODEs numerically while preserving a first integral. Phys. Lett. A, 1996, 218: 223 ~ 228

20 Quispel G R W, Turner G S. Discrete gradient methods for solving ODEs numerically while preserving a first integral. J. Phys. A. 1996, 29: L341 ~ L349

21 McLachlan R I, Quispel G R W, Robidoux N. Geometric integration using discrete gradients. Phil. Trans. R. Soc. Lond. A, 1999, 357: 1021 ~ 1045

22 Itoh T, Abe K. Hamiltonian-conserving discrete canonical equations based on variational difference quotients. J. Comput. Phys. 1988, 77: 85 ~ 102

23 Harten A, Lax P D, van Leer B. On upstream differencing and Godunov-type schemes for hyperbolic conservation laws. SIAM Rev., 1983, 25: 35 ~ 61

24 Wilcox R M. Exponential operators and parameter differentiation in quantum physics. J. Math. Phys., 1967, 8: 962 ~ 982

25 Arnold V I. Mathematical method of classical-mechanics. 2nd ed. New York: Springer-Verlag, 1989

26 Blanes S, Cacas F, Oteo J A, Ros J. Magnus and Fer expansion for matrix differential equations: the convergence problem. J. Phys. A: Math. Gen. 1998, 31: 259 ~ 268

27 Blanes S, Cacas F, Ros J. Improved high order integrators based on the Magnus expansion. BIT, 2000, 40(3): 434 ~ 450

28 Iserles A, Nφrsett S P. On the solution of linear differential equations in

Lie groups. Phil. Trans. R. Soc. , Lond. A，1999，357：983 ～ 1019

29 Moan P C. Efficient approximation of Sturm-Liouville problom using Lie-group methods，DAMTP Tech. Report 1998/NA11. University of Cambridge，1998

30 Moan P C，Oteo J A，Ros J. On the existence of the exponential solution of linear differential systems. J. Phys. A：Math. Gen. 1999，32：5133 ～ 5139

第四章　耗散广义 Hamilton 约束系统的李群积分法

4.1 引　言

微分代数方程在许多应用中出现。在流体力学、化学反应动力学、电子网络的仿真和飞行器控制工程等领域都有这种类型的动力学系统需要研究。本章主要讲述耗散广义 Hamilton 系统范围内的微分代数方程的求解问题,要求动力学系统的运动轨迹保持在由约束方程定义的流形上的同时,还要充分考虑广义 Hamilton 系统的几何结构。

人们已经广泛研究了 Hamilton 系统的数值积分方法,越来越多的数据显示,用典则离散格式求解 Hamilton 系统在较长的时间段计算效果最好[1~3],它保持了 Hamilton 矢量场的流的辛结构。大量的文献[4~8]讨论了关于无约束 Hamilton 系统的保持原系统内在结构的李群积分法。然而,Hamilton 系统形式描述的是可以忽略耗散的物理过程。最近,耗散系统已经引起大家的关注[9~10],文献[10]中给出了带耗散的广义 Hamilton 系统的微分方程模型及其结构性质。约束和耗散一样到处存在,人们自然会问:保持 Hamilton 系统辛几何结构的积分方法能否推广应用于求解耗散 Hamilton 系统?广义 Hamilton 系统的微分代数方程应怎样正确求解?B. Leimkuhler 和 S. Reich 导出了适用于带有约束的守恒系统的离散格式[11~14],但是只讨论了具有完整约束的 Hamilton 系统的积分方法。目前,还没有文献讨论非完整约束系统的几何积分

方法。有关耗散系统的文章更少。第三章研究了耗散广义 Hamilton 系统的李群积分方法，本章将讨论带耗散的广义 Hamilton 约束系统的数值求解问题，其主要思想是把耗散广义 Hamilton 约束系统看做一个流形上的广义 Hamilton 系统。因为数值积分必须在 $\boldsymbol{R}^n$ 上进行，本书在约束流形嵌入其中的欧几里得空间构造新的常微分方程系统，并保持约束流形为其不变流形，这样就把广义 Hamilton 约束系统化为无约束的常微分方程系统。进而，给出了保持系统内在结构和约束不变性的李群积分方法，并进行了约束不变量的误差分析。另外，为了进一步简化积分过程，通过引入拉格朗日乘子和采用投影技术对广义 Hamilton 约束系统直接进行积分。因为本书的讨论对完整与非完整约束不加区分，进行一样的处理，所以也适用于非完整约束的情形。数值实验结果显示本书所论述的方法是有效的。

4.2　Hamilton 约束系统的辛积分

4.2.1　Hamilton 约束系统

考虑 Hamilton 约束系统：

$$\left.\begin{aligned}\dot{\boldsymbol{q}} &= \frac{\partial H(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p})}{\partial \boldsymbol{p}} \\ \dot{\boldsymbol{p}} &= -\frac{\partial H(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p})}{\partial \boldsymbol{q}}\end{aligned}\right\} \tag{4.1}$$

满足约束条件

$$\boldsymbol{g}(\boldsymbol{q}) = 0 \tag{4.2}$$

其中，$\boldsymbol{q},\boldsymbol{p} \in \boldsymbol{R}^n$，$\boldsymbol{g}:\boldsymbol{R}^n \to \boldsymbol{R}^m$，$H:\boldsymbol{R}^{2n} \to \boldsymbol{R}$ 是光滑函数，称为系统的 Hamilton 函数，一般地，它有如下形式：

$$H(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p}) = \frac{\boldsymbol{p}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{M}^{-1}\boldsymbol{p}}{2} + \boldsymbol{V}(\boldsymbol{q}) \tag{4.3}$$

式中，正定矩阵 $\boldsymbol{M}$ 为系统的质量矩阵。

常见的处理办法就是把约束条件换做一种强加的势能，如果系统背离了约束条件，该势能就会变得很大，也就是用修正的 Hamilton 函数 H_C 所对应的无约束 Hamilton 系统来代替原问题进行求解，即

$$H_C(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p}) = H(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p}) + \frac{1}{2\varepsilon}\boldsymbol{g}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{q})\boldsymbol{g}(\boldsymbol{q})$$

其中，$0 < \varepsilon \ll 1$，而相应的运动方程为

$$\left.\begin{aligned} \dot{\boldsymbol{q}} &= \frac{\partial H(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p})}{\partial \boldsymbol{p}} \\ \dot{\boldsymbol{p}} &= -\frac{\partial H(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p})}{\partial \boldsymbol{q}} - \frac{1}{\varepsilon}\boldsymbol{G}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{q})\boldsymbol{g}(\boldsymbol{q}) \end{aligned}\right\} \tag{4.4}$$

其中，$\boldsymbol{G}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{q}) = \dfrac{\partial \boldsymbol{g}(\boldsymbol{q})}{\partial \boldsymbol{q}} = \boldsymbol{g}_{\boldsymbol{q}}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{q}) \in \boldsymbol{R}^{n\times m}$。引入新的变量 $\boldsymbol{\lambda} \in \boldsymbol{R}^{m}$，$\boldsymbol{\lambda} = \dfrac{1}{\varepsilon}\boldsymbol{g}(\boldsymbol{q})$，则方程式(4.4) 又可以写为

$$\left.\begin{aligned} \dot{\boldsymbol{q}} &= \frac{\partial H(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p})}{\partial \boldsymbol{p}} \\ \dot{\boldsymbol{p}} &= -\frac{\partial H(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p})}{\partial \boldsymbol{q}} - \boldsymbol{G}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{q})\boldsymbol{\lambda} \\ \boldsymbol{\lambda} &= \frac{1}{\varepsilon}\boldsymbol{g}(\boldsymbol{q}) \end{aligned}\right\} \tag{4.5}$$

当 $\varepsilon \to 0$ 时，即是约束 Hamilton 系统，即

$$\left.\begin{aligned} \dot{\boldsymbol{q}} &= \frac{\partial H(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p})}{\partial \boldsymbol{p}} \\ \dot{\boldsymbol{p}} &= -\frac{\partial H(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p})}{\partial \boldsymbol{q}} - \boldsymbol{G}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{q})\boldsymbol{\lambda} \\ \boldsymbol{0} &= \boldsymbol{g}(\boldsymbol{q}) \end{aligned}\right\} \tag{4.6}$$

注意，上述方程同样可以由约束 Lagrange 型变分原理获得。另外，将式(4.2) 对时间求一次导数，并把 $\dot{\boldsymbol{q}} = \dfrac{\partial H(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p})}{\partial \boldsymbol{p}}$ 代入，可得

$$\boldsymbol{G}(\boldsymbol{q})\frac{\partial H(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p})}{\partial \boldsymbol{p}}=\boldsymbol{0} \tag{4.7}$$

因此除了显式约束式(4.2)之外，还有一个隐含的约束条件式(4.7)。本节均假设矩阵 $\boldsymbol{G}(\boldsymbol{q})\boldsymbol{H}_{pp}(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p})\boldsymbol{G}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{q})$ 是可逆的，那么，将式(4.2)对时间求两次导数便可得求解 $\boldsymbol{\lambda}$ 的方程。可见，式(4.6)实际是在$(2n-2m)$维流形

$$M=\{(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p}):\boldsymbol{g}(\boldsymbol{q})=\boldsymbol{0},\ \boldsymbol{G}(\boldsymbol{q})\nabla_{p}H(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p})=\boldsymbol{0}\}$$

上定义了一个 Hamilton 矢量场，其中$\nabla_{p}H(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p})=\dfrac{\partial H(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p})}{\partial \boldsymbol{p}}$。为了便于设计方法，采用 Poisson 括号记上述约束系统，记 $\boldsymbol{x}=(\boldsymbol{q}^{\mathrm{T}},\boldsymbol{p}^{\mathrm{T}})^{\mathrm{T}},\boldsymbol{q},\boldsymbol{p}\in\boldsymbol{R}^{n}$，则式(4.6)可以写成

$$\dot{\boldsymbol{x}}=\{\boldsymbol{x},H\}+\{\boldsymbol{x},\boldsymbol{g}\}\boldsymbol{\lambda} \tag{4.8}$$

$$\boldsymbol{0}=\boldsymbol{g} \tag{4.9}$$

式中，$\{\cdot,\cdot\}$ 是 Hamilton 系统的标准 Poisson 括号，即

$$\{\boldsymbol{F},\boldsymbol{G}\}=\boldsymbol{F}_{q}\boldsymbol{G}_{p}^{\mathrm{T}}-\boldsymbol{F}_{p}\boldsymbol{G}_{q}^{\mathrm{T}} \tag{4.10}$$

式中，$\boldsymbol{F}$ 和 $\boldsymbol{G}$ 是关于 $\boldsymbol{q}$ 和 $\boldsymbol{p}$ 的光滑的向量函数，即 $\boldsymbol{F}:\boldsymbol{R}^{2n}\rightarrow\boldsymbol{R}^{l}$，$\boldsymbol{G}:\boldsymbol{R}^{2n}\rightarrow\boldsymbol{R}^{k},k,l\geqslant 1$。由式(4.9)知

$$\boldsymbol{0}=\dot{\boldsymbol{g}}=\{\boldsymbol{g},H\}+\{\boldsymbol{g},\boldsymbol{g}\}\boldsymbol{\lambda}=\{\boldsymbol{g},H\} \tag{4.11}$$

所以，还有隐含的约束函数 $\boldsymbol{f}:=\{\boldsymbol{g},H\}=\boldsymbol{G}\nabla_{p}H$，其中的 $\boldsymbol{G}=\boldsymbol{g}_{q}$。约束流形实际为

$$M=\{(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p}):\boldsymbol{g}(\boldsymbol{q})=0,\ \boldsymbol{f}(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p})=0\} \tag{4.12}$$

流形上的辛结构为无约束 Hamilton 系统的辛结构在流形 M 上的限制。

另外，隐含约束函数 $\boldsymbol{f}$ 应满足

$$\boldsymbol{0}=\dot{\boldsymbol{f}}=\{\boldsymbol{f},H\}+\{\boldsymbol{f},\boldsymbol{g}\}\boldsymbol{\lambda} \tag{4.13}$$

因为，假设

$$\{\boldsymbol{f},\boldsymbol{g}\}=\boldsymbol{G}(\boldsymbol{q})\boldsymbol{H}_{pp}(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p})\boldsymbol{G}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{q}) \tag{4.14}$$

可逆，所以不难算出 $\boldsymbol{\lambda}$ 为

$$\boldsymbol{\lambda} = -\{\boldsymbol{f},\boldsymbol{g}\}^{-1}\{\boldsymbol{f},H\} \tag{4.15}$$

把 $\boldsymbol{\lambda}$ 的表达式代入式(4.8)，即得到一无约束的动力系统形式，即

$$\dot{\boldsymbol{x}} = \{\boldsymbol{x},H\} - \{\boldsymbol{x},\boldsymbol{g}\}\{\boldsymbol{f},\boldsymbol{g}\}^{-1}\{\boldsymbol{f},H\} \tag{4.16}$$

一般情况下，上述无约束系统不是一个 Poisson 括号下的 Hamilton 系统。为此引入一个修正的 Hamilton 函数

$$H_M = H + \boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g} \tag{4.17}$$

式中，$\boldsymbol{\lambda}$ 为式(4.15) 中确定的关于 $\boldsymbol{x}$ 的表达式，这样得到一无约束的 Hamilton 系统为

$$\dot{\boldsymbol{x}} = \{\boldsymbol{x},H_M\} = \{\boldsymbol{x},H\} + \{\boldsymbol{x},\boldsymbol{g}\}\boldsymbol{\lambda} + \{\boldsymbol{x},\boldsymbol{\lambda}\}\boldsymbol{g} \tag{4.18}$$

在流形 M 上，$\boldsymbol{g} = \boldsymbol{0}$，可见，在流形 M 上式(4.18) 同式(4.16)。这时可以用求解无约束 Hamilton 系统的任意辛积分格式求解式(4.18)，但是，数值结果不能很好地保持约束流形不变。因此下面通过投影的方法来弥补这个问题。

4.2.2 Hamilton 约束系统的辛积分

本节将导出约束系统式(4.6) 的保持其约束不变形的辛积分格式。这些辛格式是通过将无约束系统的一阶或二阶辛格式和投影映射

$$\begin{aligned} \bar{\boldsymbol{q}} &= \boldsymbol{q} \\ \bar{\boldsymbol{p}} &= \boldsymbol{p} - h\boldsymbol{G}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{q})\boldsymbol{\lambda}(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p}) \end{aligned} \tag{4.19}$$

合成而得，通过适当的方法选取 $\boldsymbol{\lambda}$，使得总体格式同时满足约束条件。

引理 4.1 设 $\boldsymbol{\lambda}:\boldsymbol{R}^{2n} \to \boldsymbol{R}^m$ 是 $\boldsymbol{x} = (\boldsymbol{q}^{\mathrm{T}},\boldsymbol{p}^{\mathrm{T}})^{\mathrm{T}}$ 的任意函数，又设 $\boldsymbol{q}$ 满足 $\boldsymbol{g}(\boldsymbol{q}) = 0$，那么，映射式(4.19) 是一个典则映射，也就是说它是一个辛映射。

证明 由一阶辛 Euler 方法离散由 Hamilton 函数 $H = \boldsymbol{g}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\lambda}$ 导出的无约束 Hamilton 系统即是辛映射，即

$$
\begin{aligned}
\bar{\boldsymbol{q}} &= \boldsymbol{q} + h\boldsymbol{\lambda}_p^{\mathrm{T}}(\bar{\boldsymbol{q}},\boldsymbol{p})\boldsymbol{g}(\bar{\boldsymbol{q}}) \\
\bar{\boldsymbol{p}} &= \boldsymbol{p} - h[\boldsymbol{\lambda}_q^{\mathrm{T}}(\bar{\boldsymbol{q}},\boldsymbol{p})\boldsymbol{g}(\bar{\boldsymbol{q}}) + \boldsymbol{G}^{\mathrm{T}}(\bar{\boldsymbol{q}})\boldsymbol{\lambda}(\bar{\boldsymbol{q}},\boldsymbol{p})]
\end{aligned}
\tag{4.20}
$$

根据约束条件 $\boldsymbol{g}(\boldsymbol{q}) = \boldsymbol{g}(\bar{\boldsymbol{q}}) = \boldsymbol{0}$，即可得到式(4.19)。

根据 Hairer 的后延误差的分析结果，存在一个可以表示为渐进展开式的扰动 Hamilton 函数 $\widetilde{H}$，使得式(4.20)是它对应的 Hamilton 系统的精确的时间 h 流。根据假设的条件 $\boldsymbol{g}(\boldsymbol{q}) = \boldsymbol{0}$，那么扰动 Hamilton 函数 $\widetilde{H}$ 可以写成 $\widetilde{H} = \boldsymbol{g}^{\mathrm{T}}\tilde{\boldsymbol{\lambda}}$，其中 $\tilde{\boldsymbol{\lambda}}$ 可以理解为 $\boldsymbol{\lambda}$ 函数的一个扰动量。那么可以把映射式(4.19)写为 $\exp(h\boldsymbol{d}_{\boldsymbol{g}^{\mathrm{T}}\tilde{\boldsymbol{\lambda}}})$，其中的微分算子 $\boldsymbol{d}_G$，$G:\boldsymbol{R}^{2n} \to \boldsymbol{R}$ 同第三章的定义，即 $\boldsymbol{d}_G\boldsymbol{F} = \{\boldsymbol{F},G\}$。为简单记，将不区分 $\boldsymbol{\lambda}$ 和 $\tilde{\boldsymbol{\lambda}}$，把 $\exp(h\boldsymbol{d}_{\boldsymbol{g}^{\mathrm{T}}\tilde{\boldsymbol{\lambda}}})$ 记作 $\exp(h\boldsymbol{d}_{\boldsymbol{g}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\lambda}})$。

设 $\boldsymbol{\Psi}_h$ 为与约束系统式(4.8)和式(4.9)相关的无约束系统 $\dot{\boldsymbol{x}} = \{\boldsymbol{x},H\}$ 的一阶或二阶辛算法，那么下面将用积分方法来求解原约束系统。

第一步：

$$
\left.
\begin{aligned}
\bar{\boldsymbol{q}}_k &= \boldsymbol{q}_k \\
\bar{\boldsymbol{p}}_k &= \boldsymbol{p}_k - \frac{h}{2}\boldsymbol{G}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{q}_k)\boldsymbol{\lambda}_k
\end{aligned}
\right\}
\tag{4.21}
$$

第二步：

$$
\begin{pmatrix} \bar{\boldsymbol{q}}_{k+1} \\ \bar{\boldsymbol{p}}_{k+1} \end{pmatrix} = \boldsymbol{\Psi}_h \begin{pmatrix} \bar{\boldsymbol{q}}_k \\ \bar{\boldsymbol{p}}_k \end{pmatrix}
\tag{4.22}
$$

第三步：

$$
\left.
\begin{aligned}
\boldsymbol{q}_{k+1} &= \bar{\boldsymbol{q}}_{k+1} \\
\boldsymbol{p}_{k+1} &= \bar{\boldsymbol{p}}_{k+1} - \frac{h}{2}\boldsymbol{G}^{\mathrm{T}}(\bar{\boldsymbol{q}}_{k+1})\boldsymbol{\lambda}_{k+1}
\end{aligned}
\right\}
\tag{4.23}
$$

通过选择 $\boldsymbol{\lambda}_k$，使得

$$
\boldsymbol{g}(\boldsymbol{q}_{k+1}) = \boldsymbol{0}
\tag{4.24}
$$

选择 $\boldsymbol{\lambda}_{k+1}$，使得

$$
\boldsymbol{f}(\boldsymbol{q}_{k+1},\boldsymbol{p}_{k+1}) = \{\boldsymbol{g},H\} = \boldsymbol{0}
\tag{4.25}
$$

根据 Hairer 的后延误差的分析理论，对于映射 $\boldsymbol{\Psi}_h$，存在一个可以表示为渐进展开式的扰动 Hamilton 函数 $\widetilde{H}$，使得 $\boldsymbol{\Psi}_h$ 可以表示为 $\boldsymbol{\Psi}_h = \exp(h\boldsymbol{d}_{\widetilde{H}})$，而 $\widetilde{H} = H + O(h^{\nu})$，$\nu = 1,2$，它依赖于 $\boldsymbol{\Psi}_h$ 是一阶还是二阶方法。如果将上述约束系统的积分格式记作 $\boldsymbol{\Phi}_h$：$M \to M$，那么它可以表示为

$$\boldsymbol{\Phi}_h = \exp\left(\frac{h}{2}\boldsymbol{d}_{\boldsymbol{g}^{\mathrm{T}}\lambda_{k+1}}\right) \circ \exp(h\boldsymbol{d}_{\widetilde{H}}) \circ \exp\left(\frac{h}{2}\boldsymbol{d}_{\boldsymbol{g}^{\mathrm{T}}\lambda_k}\right) \quad (4.26)$$

它满足

$$\boldsymbol{g} \circ \boldsymbol{\Phi}_h = \boldsymbol{f} \circ \boldsymbol{\Phi}_h = \boldsymbol{0} \quad (4.27)$$

定理 4.1 积分格式式(4.26)是一个保持约束的辛算法，且与 $\boldsymbol{\Psi}_h$ 具有同样的精度，即当 $\boldsymbol{\Psi}_h$ 为一阶精度时，$\boldsymbol{\Phi}_h$ 是一阶算法；当 $\boldsymbol{\Psi}_h$ 是二阶精度时，$\boldsymbol{\Phi}_h$ 是二阶算法。

证明 由算法的构造可见它是辛算法，而且保持约束不变。要证明它的计算精度与 $\boldsymbol{\Psi}_h$ 的相同，需要用两次 BCH 公式来计算式(4.26)，最后 $\boldsymbol{\Phi}_h$ 表示为

$$\boldsymbol{\Phi}_h = \exp(h\boldsymbol{d}_{\widetilde{H}_M}) \quad (4.28)$$

式中，$\widetilde{H}_M$ 为

$$\widetilde{H}_M = \widetilde{H} + \frac{1}{2}\boldsymbol{g}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{\lambda}_k + \boldsymbol{\lambda}_{k+1}) + \frac{h}{4}(\{\boldsymbol{g},\widetilde{H}\}(\boldsymbol{\lambda}_k - \boldsymbol{\lambda}_{k+1})) + O(h^2) \quad (4.29)$$

因为 $\boldsymbol{f} \circ \boldsymbol{\Phi}_h = \boldsymbol{f} \circ \exp(h\boldsymbol{d}_{\widetilde{H}_M}) = \boldsymbol{0}$，所以有

$$\{\boldsymbol{f},\widetilde{H}_M\} = \{\boldsymbol{f},\widetilde{H}\} + \frac{1}{2}\{\boldsymbol{f},\boldsymbol{g}\}(\boldsymbol{\lambda}_k + \boldsymbol{\lambda}_{k+1}) + O(h) = \boldsymbol{0} \quad (4.30)$$

又因为 $\widetilde{H} = H + O(h)$，由式(4.30)可得

$$\frac{1}{2}(\boldsymbol{\lambda}_k + \boldsymbol{\lambda}_{k+1}) = \boldsymbol{\lambda} + O(h) \quad (4.31)$$

式中，$\boldsymbol{\lambda}$ 为由式(4.15)确定的 $\boldsymbol{\lambda}$。因此，如果 $\boldsymbol{\Psi}_h$ 为一阶精度，则

$$\widetilde{H}_M = H_M + O(h) \tag{4.32}$$

式中，$H_M = H + \boldsymbol{g}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\lambda}$。如果 $\boldsymbol{\Psi}_h$ 为二阶精度，则 $\boldsymbol{g}\circ\boldsymbol{\Phi}_h = \boldsymbol{0}$，就是

$$\{\boldsymbol{g},\widetilde{H}_M\} = \{\boldsymbol{g},\widetilde{H}\} + \frac{h}{4}\{\boldsymbol{g},\{\boldsymbol{g},\widetilde{H}\}\}(\boldsymbol{\lambda}_k - \boldsymbol{\lambda}_{k+1}) + O(h^2) =$$

$$\boldsymbol{f} + \frac{h}{4}\{\boldsymbol{g},\boldsymbol{f}\}(\boldsymbol{\lambda}_k - \boldsymbol{\lambda}_{k+1}) + O(h^2) \tag{4.33}$$

因此，$\boldsymbol{\lambda}_k - \boldsymbol{\lambda}_{k+1} = O(h)$，而 $\boldsymbol{\lambda}_k + \boldsymbol{\lambda}_{k+1} = \boldsymbol{\lambda} + O(h^2)$，最后，可得 $\widetilde{H}_M = H_M + O(h^2)$，这就证明了二阶精度的情形。

参数 $\boldsymbol{\lambda}_k$ 和 $\boldsymbol{\lambda}_{k+1}$ 分别由 $\boldsymbol{g}\circ\boldsymbol{\Phi}_h = \boldsymbol{0}$ 和 $\boldsymbol{f}\circ\boldsymbol{\Phi}_h = \boldsymbol{0}$ 确定，因为，如果假设 $\boldsymbol{G}(\boldsymbol{q})\boldsymbol{H}_{pp}(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p})\boldsymbol{G}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{q})$ 是可逆的，那么，当 h 在足够小的情况下，这些方程有惟一解，因此，可以用简单的 Newton 方法求其数值解。而 $\boldsymbol{\lambda}_k$ 和 $\boldsymbol{\lambda}_{k+1}$ 的初始值可以由 $\boldsymbol{\lambda}(\boldsymbol{q}_k,\boldsymbol{p}_k)$ 及上述的误差估计来猜测。另外，定理 4.1 的证明其实提供了约束系统的一个后延误差分析过程，也就是说，总存在可以渐进展开的扰动 Hamilton 函数 $\widetilde{H}_M$，使得

$$\{\boldsymbol{g},\widetilde{H}_M\} = \{\boldsymbol{f},\widetilde{H}_M\} = \boldsymbol{0} \tag{4.34}$$

在 M 上成立（也就是说 M 是一个不变流形）。而

$$\widetilde{H}_M = H_M + O(h^{\nu}) \tag{4.35}$$

式中，$\nu = 1,2$ 依赖于式(4.26)的计算精度，最后可得 $\boldsymbol{\Phi}_h = \exp(h\boldsymbol{d}_{\widetilde{H}_M})$。

下面讨论具体的 Hamilton 约束系统的几个不同的积分格式。设 Hamilton 函数为

$$H(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p}) = \frac{\boldsymbol{p}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{M}^{-1}\boldsymbol{p}}{2} + V(\boldsymbol{q}) \tag{4.36}$$

首先考虑一阶辛 Euler 方法，关于变量 $\boldsymbol{q}$ 的迭代格式为

$$\boldsymbol{q}_{k+1} = \boldsymbol{q}_k + h\boldsymbol{M}^{-1}\boldsymbol{p}_k - h^2\boldsymbol{M}^{-1}\nabla V(\boldsymbol{q}_k) - \frac{h^2}{2}\boldsymbol{M}^{-1}\boldsymbol{G}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{q}_k)\boldsymbol{\lambda}_k \tag{4.37}$$

式(4.37)满足

$$\boldsymbol{g}(\boldsymbol{q}_{k+1}) = \boldsymbol{0} \tag{4.38}$$

变量 $\boldsymbol{p}$ 的迭代格式为

$$\boldsymbol{p}_{k+1} = \boldsymbol{p}_k - h\,\nabla V(\boldsymbol{q}_k) - \frac{h}{2}\boldsymbol{G}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{q}_k)\boldsymbol{\lambda}_k + \boldsymbol{G}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{q}_{k+1})\boldsymbol{\lambda}_{k+1} \tag{4.39}$$

式中，$\boldsymbol{\lambda}_{k+1}$ 由下式确定：

$$\boldsymbol{G}(\boldsymbol{q}_{k+1})\boldsymbol{M}^{-1}\boldsymbol{p}_{k+1} = \boldsymbol{0} \tag{4.40}$$

我们还可以构造如下二阶格式：

$$\boldsymbol{q}_{k+1} = \boldsymbol{q}_k + h\boldsymbol{M}^{-1}\boldsymbol{p}_{k+1/2} \tag{4.41}$$

$$\boldsymbol{p}_{k+1/2} = \boldsymbol{p}_k - \frac{h}{2}(\nabla V(\boldsymbol{q}_k) + \boldsymbol{G}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{q}_k)\boldsymbol{\lambda}_k) \tag{4.42}$$

$$\boldsymbol{g}(\boldsymbol{q}_{k+1}) = \boldsymbol{0} \tag{4.43}$$

及

$$\boldsymbol{p}_{k+1} = \boldsymbol{p}_{k+1/2} - \frac{h}{2}(\nabla V(\boldsymbol{q}_{k+1}) + \boldsymbol{G}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{q}_{k+1})\boldsymbol{\lambda}_{k+1}) \tag{4.44}$$

$$\boldsymbol{G}(\boldsymbol{q}_{k+1})\boldsymbol{M}^{-1}\boldsymbol{p}_{k+1} = \boldsymbol{0} \tag{4.45}$$

上述积分格式显然是辛格式。然而由于方法的稳定性要求，它们有严格的步长限制。应用隐式中点格式，可以给出代数稳定方法，即

$$\boldsymbol{q}_{k+1} = \boldsymbol{q}_k + h\boldsymbol{M}^{-1}\boldsymbol{p}_k - \frac{h^2}{2}\boldsymbol{M}^{-1}\,\nabla V\left(\frac{\boldsymbol{q}_k + \boldsymbol{q}_{k+1}}{2}\right) - \frac{h^2}{2}\boldsymbol{M}^{-1}\boldsymbol{G}(\boldsymbol{q}_k)\boldsymbol{\lambda}_k \tag{4.46}$$

选取 $\boldsymbol{\lambda}_k$，使得 $\boldsymbol{g}(\boldsymbol{q}_{k+1}) = 0$。关于变量 $\boldsymbol{p}$ 的迭代方法为

$$\boldsymbol{p}_{k+1} = \boldsymbol{p}_k - h\,\nabla V\left(\frac{\boldsymbol{q}_k + \boldsymbol{q}_{k+1}}{2}\right) - \frac{h}{2}\boldsymbol{G}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{q}_k)\boldsymbol{\lambda}_k + \boldsymbol{G}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{q}_{k+1})\boldsymbol{\lambda}_{k+1} \tag{4.47}$$

选取 $\boldsymbol{\lambda}_{k+1}$，使得 $\boldsymbol{G}(\boldsymbol{q}_{k+1})\boldsymbol{M}^{-1}\boldsymbol{p}_{k+1} = \boldsymbol{0}$。该方法可以用于分子动力学系统中的具有 Hamilton 函数为

$$H(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p}) = \frac{\boldsymbol{p}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{M}^{-1}\boldsymbol{p}}{2} + V_1(\boldsymbol{q}) + \frac{1}{\varepsilon}V_2(\boldsymbol{q}) \tag{4.48}$$

的 Hamilton 系统问题的求解。

4.2.3 Hamilton 约束系统的高阶辛积分

同无约束动力系统一样，对于约束系统也可以基于对称的二阶离散格式来构造高阶算法。设 $\boldsymbol{\Psi}_h$ 是对应的无约束系统的一个对称二阶算法，那么，对于约束系统式(4.8)，式(4.9)，用映射

$$\boldsymbol{\Phi}_h = \boldsymbol{\Psi}_h \circ \exp\left(\frac{h}{2}\boldsymbol{d}_{\boldsymbol{g}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\lambda}}\right) \tag{4.49}$$

作为基本方法来构造高阶方法，其中通过选取 $\boldsymbol{\lambda}$ 使得 $\boldsymbol{g} \circ \boldsymbol{\Phi}_h = \boldsymbol{0}$。注意式(4.49)与式(4.26)同，但没有向 $\boldsymbol{f} = \boldsymbol{0}$ 进行投影。现在考虑的合成方法为

$$\exp\left(\frac{h}{2}\boldsymbol{d}_{\boldsymbol{g}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\lambda}}\right) \circ \boldsymbol{\Phi}_{c_1 h} \circ \boldsymbol{\Phi}_{c_2 h} \circ \boldsymbol{\Phi}_{c_3 h} \tag{4.50}$$

选取 $\boldsymbol{\lambda}$，使 $\boldsymbol{f} = \boldsymbol{0}$。该格式显然是辛格式，而且是保持约束不变的。

定理 4.2 如果 $2c_1 + c_2 = 2$，且 $2c_1^3 + c_2^3 = 0$，那么近似方法式(4.50)是一个四阶算法。进一步推广，如果 $\boldsymbol{\Phi}_h$ 是 $\nu = 2l,\ l > 1$ 阶算法而且是对称的，那么，对于合成方法式(4.50)，当 $2c_1 + c_2 = 2$，且 $2c_1^{\nu+1} + c_2^{\nu+1} = 0$ 时，它是 $\nu + 2$ 阶的算法。

证明 首先考虑合成方法

$$\boldsymbol{\Phi}_{c_1 h} \circ \boldsymbol{\Phi}_{c_2 h} \circ \boldsymbol{\Phi}_{c_3 h} \tag{4.51}$$

式中

$$\boldsymbol{\Phi}_h = \exp\left(\frac{h}{2}\boldsymbol{d}_{\boldsymbol{g}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\lambda}}\right) \circ \boldsymbol{\Psi}_h \circ \exp\left(\frac{h}{2}\boldsymbol{d}_{\boldsymbol{g}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\lambda}}\right) \tag{4.52}$$

并通过选取 $\boldsymbol{\lambda}$，使得 $\boldsymbol{g} \circ \boldsymbol{\Phi}_h = \boldsymbol{0}$。因为式(4.52)是对称格式，所以其相应的扰动 Hamilton 函数满足

$$\widetilde{H} = H_0 + h^2 H_2 + h^4 H_4 + \cdots \tag{4.53}$$

注意，式(4.51)保持约束条件 $\boldsymbol{g} = \boldsymbol{0}$，没有考虑 $\boldsymbol{f} = \boldsymbol{0}$。然而，因为式(4.51)满足 $\boldsymbol{f} = O(h^{\nu+1})$，所以，另外向 $\boldsymbol{f} = \boldsymbol{0}$ 而作的投影步骤 $\exp\left(\frac{h}{2}\boldsymbol{d}_{\boldsymbol{g}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\lambda}}\right)$ 不会影响整体算法的精度。事实上多次应用式(4.52)

的效果与最后的合成算法式(4.50)是一样的，只是计算步长有所不同。

4.2.4 化为无约束系统的辛积分方法

本节将利用约束系统的变形形式式(4.6)，来导出高阶的保持约束的辛方法。也即讨论等价的无约束系统

$$\dot{\boldsymbol{x}} = \{\boldsymbol{x}, H_M\} = \{\boldsymbol{x}, H\} + \{\boldsymbol{x}, \boldsymbol{g}\}\boldsymbol{\lambda} + \{\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\lambda}\}\boldsymbol{g} \tag{4.54}$$

式中，$\boldsymbol{\lambda}$ 由式(4.15)给出。

可以用通常意义下的 Hamilton 系统的任意一个辛算法来离散式(4.54)，然而，尽管采用辛格式能保持原系统的典则性质，但通常不能保持约束流形的不变性，文献[11]讨论了用这种处理方法构造的某些格式使得约束流形是指数不稳定的。为此，应用 4.2.3 节的投影方法来弥补这一点。具体地，假设 $\boldsymbol{\Psi}_h$ 是无约束系统式(4.54)的任一辛算法，$\widetilde{H}$ 是它对应的扰动 Hamilton 函数，即 $\boldsymbol{\Psi}_h = \exp(h\boldsymbol{d}_{\widetilde{H}})$，而 $\widetilde{H} = H_M + O(h^\nu)$，其中 ν 是近似方法 $\boldsymbol{\Psi}_h$ 的计算精度。这时给出保持约束不变性的积分格式 $\boldsymbol{\Phi}_h$ 为

$$\boldsymbol{\Phi}_h = \exp\left(\frac{h}{2}\boldsymbol{d}_{\boldsymbol{g}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\lambda}_{k+1}}\right)\circ\exp(h\boldsymbol{d}_{\widetilde{H}})\circ\exp\left(\frac{h}{2}\boldsymbol{d}_{\boldsymbol{g}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\lambda}_k}\right) \tag{4.55}$$

式中，$\boldsymbol{\lambda}_k$ 和 $\boldsymbol{\lambda}_{k+1}$ 由 $\boldsymbol{g}\circ\boldsymbol{\Phi}_h = \boldsymbol{f}\circ\boldsymbol{\Phi}_h = \boldsymbol{0}$ 确定。

定理 4.3 积分格式式(4.55)是保持约束的辛格式，而且它的计算精度与 $\boldsymbol{\Psi}_h = \exp(h\boldsymbol{d}_{\widetilde{H}})$ 的计算精度相同。

证明 积分格式式(4.55)是辛的且能保持约束流形不变是显然的。下面主要证明 $\boldsymbol{\Phi}_h$ 与 $\boldsymbol{\Psi}_h$ 具有相同计算精度。首先，有 $\boldsymbol{g}\circ\boldsymbol{\Psi}_h = O(h^\nu)$ 以及 $\boldsymbol{f}\circ\boldsymbol{\Psi}_h = O(h^\nu)$，其中 ν 是近似方法 $\boldsymbol{\Psi}_h$ 的计算精度。把 $\boldsymbol{\Psi}_h$ 写为

$$\boldsymbol{q}_{k+1} = \boldsymbol{q}_k + hF_{\boldsymbol{q}}(\boldsymbol{q}_k, \boldsymbol{p}_k) \tag{4.56}$$

$$\boldsymbol{p}_{k+1} = \boldsymbol{p}_k + hF_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{q}_k, \boldsymbol{p}_k) \tag{4.57}$$

因为

$$\boldsymbol{\lambda}_k = O(h^{\nu-1}) \tag{4.58}$$

而 $\boldsymbol{G}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{q}_{k+1}) = \boldsymbol{G}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{q}_k) + O(h^{\nu})$，所以

$$\boldsymbol{\lambda}_k + \boldsymbol{\lambda}_{k+1} = O(h^{\nu}) \tag{4.59}$$

同定理 4.2 的证明一样，存在扰动 Hamilton 函数 $\widetilde{H}_M$，使得 $\boldsymbol{\Phi}_h = \exp(h\boldsymbol{d}_{\widetilde{H}_M})$，$\widetilde{H}_M$ 的渐进展开式同式(4.29)。因为 $\boldsymbol{\lambda}_k$ 和 $\boldsymbol{\lambda}_{k+1}$ 满足式(4.58) 和式(4.59)，所以由式(4.29) 即得 $\widetilde{H}_M = H_M + O(h^{\nu})$，而 $H_M = H + \boldsymbol{g}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\lambda}$。

现在不妨设无约束系统式(4.54) 用一个辛龙格库塔方法来离散，记它的 Butcher 表为

$$\begin{array}{c|c} \boldsymbol{C} & \boldsymbol{A} \\ \hline & \boldsymbol{b}^{\mathrm{T}} \end{array}$$

采用张量积符号，那么计算格式式(4.55) 即成为

$$\left.\begin{aligned}
&\boldsymbol{q}_{k+1} = \boldsymbol{q}_k + h(\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}} \otimes \boldsymbol{I})\,\nabla_p H_M \\
&\overline{\boldsymbol{p}}_{k+1} = \boldsymbol{p}_k - h(\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}} \otimes \boldsymbol{I})\,\nabla_q H_M - \frac{h}{2}\boldsymbol{G}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{q}_k)\boldsymbol{\lambda}_k \\
&\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{e} \otimes \boldsymbol{q}_k + h(\boldsymbol{A} \otimes \boldsymbol{I})\,\nabla_p H_M \\
&\boldsymbol{P} = \boldsymbol{e} \otimes \boldsymbol{p}_k - h(\boldsymbol{A} \otimes \boldsymbol{I})\,\nabla_q H_M - \frac{h}{2}\boldsymbol{e} \otimes \boldsymbol{G}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{q}_k)\boldsymbol{\lambda}_k \\
&\boldsymbol{g}(\boldsymbol{q}_{k+1}) = \boldsymbol{0}
\end{aligned}\right\} \tag{4.60}$$

而

$$\left.\begin{aligned}
&\boldsymbol{p}_{k+1} = \overline{\boldsymbol{p}}_{k+1} - \frac{h}{2}\boldsymbol{G}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{q}_{k+1})\boldsymbol{\lambda}_{k+1} \\
&\boldsymbol{f}(\boldsymbol{q}_{k+1}, \boldsymbol{p}_{k+1}) = \boldsymbol{0}
\end{aligned}\right\} \tag{4.61}$$

式中，$\boldsymbol{e}^{\mathrm{T}} = (1,1,\cdots,1)$，$\boldsymbol{I}$ 是恒等矩阵，另外

$$\boldsymbol{Q} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{Q}^1 \\ \boldsymbol{Q}^2 \\ \vdots \\ \boldsymbol{Q}^s \end{bmatrix}, \quad \nabla_p H_M = \begin{bmatrix} \nabla_p H_M(\boldsymbol{Q}^1, \boldsymbol{P}^1) \\ \nabla_p H_M(\boldsymbol{Q}^2, \boldsymbol{P}^2) \\ \vdots \\ \nabla_p H_M(\boldsymbol{Q}^s, \boldsymbol{P}^s) \end{bmatrix}$$

等等。如果矩阵 $\boldsymbol{A}$ 可逆而步长 h 足够小，则式(4.60) 中的$(\boldsymbol{q}_{k+1}, \overline{\boldsymbol{p}}_{k+1}, \boldsymbol{\lambda}_k)$存在且是局部惟一的，进一步可以用简单的 Newton 迭代

法来求解非线性系统式(4.60)，这时它的近似的 Jacobi 矩阵为

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{I}_{sn} & -h\boldsymbol{A}\otimes H_{pp}(\boldsymbol{q}_k,\boldsymbol{p}_k) & 0 \\ 0 & \boldsymbol{I}_{sn} & \frac{h}{2}\boldsymbol{e}\otimes\boldsymbol{G}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{q}_k) \\ 0 & h\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\times\boldsymbol{G}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{q}_k)H_{pp}(\boldsymbol{q}_k,\boldsymbol{p}_k) & 0 \end{bmatrix}$$

实际上，定理 4.3 给出了构造高阶保持约束不变性的辛格式的方法，这样任何适用于通常意义下的不可分的 Hamilton 系统的新方法均可应用，但是如果 H 是可分的，通常 $H_M = H+\boldsymbol{g}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\lambda}$ 是不可分的，这种情况采用 4.2.2 节及 4.2.3 节的积分格式要经济得多。

4.3 广义 Hamilton 约束系统及其变形的无约束系统

考虑广义 Hamilton 约束系统：

$$\dot{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{M}(\boldsymbol{x})\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{x}} \tag{4.62}$$

满足约束条件：

$$\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{0} \tag{4.63}$$

式中，$\boldsymbol{x}\in\boldsymbol{R}^n$，$\boldsymbol{g}:\boldsymbol{R}^n\to\boldsymbol{R}^m$，$H:\boldsymbol{R}^n\to\boldsymbol{R}$ 是光滑函数，$\boldsymbol{M}$ 是任一 $n\times n$ 矩阵，$\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{x}} = \left(\frac{\partial H}{\partial x_1},\frac{\partial H}{\partial x_2},\cdots,\frac{\partial H}{\partial x_n}\right)^{\mathrm{T}}$ 是 Hamilton 函数 H 的梯度。该系统产生的流位于$(n-2m)$维流形，即

$$\rho = \left\{\boldsymbol{x}:\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) = 0,\ \frac{\partial \boldsymbol{g}}{\partial \boldsymbol{x}}\boldsymbol{M}\left(\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{x}}\right)^{\mathrm{T}} = 0\right\}$$

式中，$\frac{\partial \boldsymbol{g}}{\partial \boldsymbol{x}}\in\boldsymbol{R}^{m\times n}$ 是 $\boldsymbol{g}$ 的 Jacobi 矩阵。

本节将导出修正的 Hamilton 函数及相应得到的变形的广义 Hamilton 系统，它满足：在约束流形 ρ 上修正的 Hamilton 函数和原系统的 Hamilton 函数恒等且 ρ 是变形的广义 Hamilton 系统产

生的流的不变流形。为此，将推得一个广义 Hamilton 常微分方程系统，它产生的流在 ρ 上正是原动力学系统式(4.62) 至式(4.63) 的流。先考虑无约束广义 Hamilton 系统式(4.62)，引入伪 Poisson 括号，即

$$\{\boldsymbol{\varphi},\boldsymbol{\psi}\} = \frac{\partial \boldsymbol{\varphi}}{\partial \boldsymbol{x}}\boldsymbol{M}\left(\frac{\partial \boldsymbol{\psi}}{\partial \boldsymbol{x}}\right)^{\mathrm{T}}$$

式中，$\boldsymbol{\varphi}:\boldsymbol{R}^n \to \boldsymbol{R}^l$ 和 $\boldsymbol{\psi}:\boldsymbol{R}^n \to \boldsymbol{R}^k (k,l \geqslant 1)$ 是足够光滑的矢量值函数，那么，式(4.62) 又可以写为

$$\dot{\boldsymbol{x}} = \{\boldsymbol{x},H\} \tag{4.64}$$

进一步引入微分算子 $\boldsymbol{D}_G$，$G:\boldsymbol{R}^n \to \boldsymbol{R}$，则有

$$\boldsymbol{D}_G F = \{F,G\}$$

那么，式(4.62) 又可以写为

$$\dot{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{D}_H \boldsymbol{x} \tag{4.65}$$

构造修正的 Hamilton 函数的主要思想是：约束 $\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) \in \boldsymbol{R}^m$ 应是无约束广义 Hamilton 系统的流的不变量，也就是，$\boldsymbol{g}$ 和 H 的伪 Poisson 括号等于零，即

$$\{\boldsymbol{g},H\} = \boldsymbol{0} \tag{4.66}$$

首先，区分两种不同类型的不变量[11]，如果 $\{\boldsymbol{\varphi},H\}$ 恒等于零，则 $\boldsymbol{\varphi}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{0}$ 称为源于 H 的广义 Hamilton 系统的流的强不变量；如果仅当 $\boldsymbol{\varphi}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{0}$ 时，$\{\boldsymbol{\varphi},H\} = \boldsymbol{0}$ 才成立，则称 $\boldsymbol{\varphi}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{0}$ 为弱不变量，后者常写作 $\boldsymbol{\varphi}(\boldsymbol{x}) \approx \boldsymbol{0}$。

下面给出命题 4.1 便于以后计算之用。

命题 4.1　对矢量值函数 $\boldsymbol{\varphi}:\boldsymbol{R}^n \to \boldsymbol{R}^l$，$\boldsymbol{\psi}:\boldsymbol{R}^n \to \boldsymbol{R}^k$ 和 $\boldsymbol{\lambda}:\boldsymbol{R}^n \to \boldsymbol{R}^k$，有

$$\{\boldsymbol{\varphi},\boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\psi}\} = \{\boldsymbol{\varphi},\boldsymbol{\psi}\}\boldsymbol{\lambda} + \{\boldsymbol{\varphi},\boldsymbol{\lambda}\}\boldsymbol{\psi} \tag{4.67}$$

证明　$$\{\boldsymbol{\varphi},\boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\psi}\} = \frac{\partial \boldsymbol{\varphi}}{\partial \boldsymbol{x}}\boldsymbol{M}\left[\frac{\partial(\boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\psi})}{\partial \boldsymbol{x}}\right]^{\mathrm{T}} =$$

$$\frac{\partial \boldsymbol{\varphi}}{\partial \boldsymbol{x}}\boldsymbol{M}\left[\left(\frac{\partial \boldsymbol{\psi}}{\partial \boldsymbol{x}}\right)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\lambda} + \left(\frac{\partial \boldsymbol{\lambda}}{\partial \boldsymbol{x}}\right)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\psi}\right] =$$

$$\{\boldsymbol{\varphi},\boldsymbol{\psi}\}\boldsymbol{\lambda}+\{\boldsymbol{\varphi},\boldsymbol{\lambda}\}\boldsymbol{\psi}$$

如果$\{\boldsymbol{g},H\}=\mathbf{0}$，则$\boldsymbol{g}$是广义 Hamilton 系统式(4.62) 的一个不变量，约束系统式(4.62) 至式(4.63) 等同于广义 Hamilton 系统式(4.62)。如果$\boldsymbol{g}$不是不变量，考虑修正的 Hamilton 函数，即

$$H_{N1}=H+\boldsymbol{\mu}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g} \tag{4.68}$$

选取函数$\boldsymbol{\mu}(\boldsymbol{x})\in\boldsymbol{R}^{m}$，使得$\boldsymbol{g}=\mathbf{0}$沿解曲线成立，即要求$\boldsymbol{g}$是源于 Hamilton 函数$H_{N1}$的广义 Hamilton 系统的流的一个弱不变量。为此，须有

$$\mathbf{0}=\{\boldsymbol{g},H_{N1}\}=\{\boldsymbol{g},H\}+\{\boldsymbol{g},\boldsymbol{\mu}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g}\}=$$
$$\{\boldsymbol{g},H\}+\{\boldsymbol{g},\boldsymbol{g}\}\boldsymbol{\mu}+\{\boldsymbol{g},\boldsymbol{\mu}\}\boldsymbol{g}$$

考虑上式中$\boldsymbol{g}=\mathbf{0}$，如果$\{\boldsymbol{g},\boldsymbol{g}\}\in\boldsymbol{R}^{m\times m}$满秩，可以得到

$$\boldsymbol{\mu}=-\{\boldsymbol{g},\boldsymbol{g}\}^{-1}\{\boldsymbol{g},H\} \tag{4.69}$$

则变形的广义 Hamilton 函数为

$$H_{N1}=H+\boldsymbol{\mu}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g} \tag{4.70}$$

如果$\{\boldsymbol{g},\boldsymbol{g}\}=\mathbf{0}$，须有$\{\boldsymbol{g},H\}\approx\mathbf{0}$，因为假设$\{\boldsymbol{g},H\}\neq\mathbf{0}$，所以必须考虑$\boldsymbol{\varphi}\equiv\{\boldsymbol{g},H\}=\mathbf{0}$是隐含的约束，则约束流形应当为

$$\rho=\{\boldsymbol{x}:\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x})=\mathbf{0},\ \{\boldsymbol{g},H\}=\mathbf{0}\} \tag{4.71}$$

而 Hamilton 函数变为

$$H_{N2}=H+\boldsymbol{\mu}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g}+\boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\varphi} \tag{4.72}$$

要想求$\boldsymbol{\mu}=\boldsymbol{\mu}(\boldsymbol{x})$和$\boldsymbol{\lambda}=\boldsymbol{\lambda}(\boldsymbol{x})$，以保证$\{\boldsymbol{g},H_{N2}\}\approx\mathbf{0}$和$\{\boldsymbol{\varphi},H_{N2}\}\approx\mathbf{0}$成立，关键在于伪 Poisson 括号组成的矩阵$\boldsymbol{P}$的可逆性，即

$$\boldsymbol{P}=\begin{bmatrix}\{\boldsymbol{g},\boldsymbol{g}\} & \{\boldsymbol{g},\boldsymbol{\varphi}\}\\ \{\boldsymbol{\varphi},\boldsymbol{g}\} & \{\boldsymbol{\varphi},\boldsymbol{\varphi}\}\end{bmatrix}$$

如果$\boldsymbol{P}$非奇异，则可以解得函数$\boldsymbol{\mu}$和$\boldsymbol{\lambda}$，使得$\boldsymbol{g}=\mathbf{0}$及$\boldsymbol{\varphi}\equiv\{\boldsymbol{g},H\}=\mathbf{0}$，它是源于$H_{N2}$的广义 Hamilton 系统的流的不变量，并且，在约束流形ρ上下式成立：

$$H_{N2}=H \tag{4.73}$$

在上述基础上，原广义 Hamilton 约束系统可以变形为无约束

广义 Hamilton 系统，即

$$\dot{\boldsymbol{x}} = \{\boldsymbol{x}, H_{N2}\} = \boldsymbol{M}\frac{\partial H_{N2}}{\partial \boldsymbol{x}} \tag{4.74}$$

或

$$\dot{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{D}_{H_{N2}}\boldsymbol{x} \tag{4.75}$$

式中

$$H_{N2} = H + \boldsymbol{\mu}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g} + \boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{T}}\frac{\partial \boldsymbol{g}}{\partial \boldsymbol{x}}\boldsymbol{M}\left(\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{x}}\right)^{\mathrm{T}}$$

$$\boldsymbol{D}_{H_{N2}} = \sum_{i,j=1}^{n}\frac{\partial H_{N2}}{\partial x_i}M_{ji}(\boldsymbol{x})\frac{\partial}{\partial x_j}$$

4.4　广义 Hamilton 约束系统的李群积分法

4.4.1　变形所得无约束广义 Hamilton 系统的李群积分法

我们采用式(4.62)至式(4.63)的变形形式进行积分，讨论无约束问题式(4.74)或式(4.75)，对变形所得广义 Hamilton 系统应用李群积分法便可获得保持原系统伪 Poisson 括号的满足约束条件的李群积分。

其解有如下形式：

$$\boldsymbol{x}(t) = [\exp(t\boldsymbol{D}_{N2})]\boldsymbol{x}(0) \tag{4.76}$$

式中，$\exp(t\boldsymbol{D}_{N2})$ 是广义 Hamilton 系统李群上的一个映射。那么，第三章的数值方法都可以应用，例如，把 $\boldsymbol{D}_{N2}$ 分裂成两个广义 Hamilton 算子 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$，其中，$\boldsymbol{A} = \sum_{i,j=1}^{n}M_{ji}(\boldsymbol{x})\frac{\partial(\boldsymbol{\mu}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g} + \boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\varphi})}{\partial x_i}\frac{\partial}{\partial x_j}$，$\boldsymbol{B} = \sum_{i,j=1}^{n}M_{ji}(\boldsymbol{x})\frac{\partial H}{\partial x_i}\frac{\partial}{\partial x_j}$。用李级数解法分别计算 $\exp(t\boldsymbol{A})$ 和 $\exp(t\boldsymbol{B})$ 的近似值，然后采用对称合成积分法求出 $\exp(t\boldsymbol{D}_{H_{N2}})$，便可以得到变形广义 Hamilton 系统的李群积分。譬如，其二阶积分格式为

$$\boldsymbol{x}(t) = \exp(t\boldsymbol{D}_{H_{N2}})\boldsymbol{x}_0 =$$

$$\left(\exp\left(\frac{1}{2}t\boldsymbol{A}\right)\exp(t\boldsymbol{B})\exp\left(\frac{1}{2}t\boldsymbol{A}\right)\right)\boldsymbol{x}_0 \tag{4.77}$$

在耗散系统，通常 $\boldsymbol{M}(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x})-\boldsymbol{S}(\boldsymbol{x})$，其中 $\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x})$ 是一个反对称矩阵，$\boldsymbol{S}(\boldsymbol{x})$ 是一个对称矩阵，如果 Hamilton 函数正定，它便可以作为系统的 Lyapunov 函数，则显然积分格式稳定。

4.4.2 约束不变量的稳定性

在 4.2 节，假定 $\{\boldsymbol{g},\boldsymbol{g}\}=\boldsymbol{0}$ 及 $\boldsymbol{\varphi}\equiv\{\boldsymbol{g},H\}\neq\boldsymbol{0}$，导出了新 Hamilton 函数，即

$$H_{N2}=H+\boldsymbol{\mu}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g}+\boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\varphi}$$

关于 $\boldsymbol{\lambda}$ 和 $\boldsymbol{\mu}$ 的条件为

$$\left.\begin{aligned}&\{\boldsymbol{g},H_{N2}\}=\boldsymbol{0}\Rightarrow\{\boldsymbol{g},H\}+\{\boldsymbol{g},\boldsymbol{\varphi}\}\boldsymbol{\lambda}=\boldsymbol{0}\\&\{\boldsymbol{\varphi},H_{N2}\}=\boldsymbol{0}\Rightarrow\{\boldsymbol{\varphi},H\}+\{\boldsymbol{\varphi},\boldsymbol{g}\}\boldsymbol{\mu}+\{\boldsymbol{\varphi},\boldsymbol{\varphi}\}\boldsymbol{\lambda}=\boldsymbol{0}\end{aligned}\right\} \tag{4.78}$$

如果 $\{\boldsymbol{\varphi},\boldsymbol{g}\}\neq\boldsymbol{0}$ 和 $\{\boldsymbol{g},\boldsymbol{\varphi}\}\neq\boldsymbol{0}$ 都是可逆矩阵，则

$$\left.\begin{aligned}&\boldsymbol{\lambda}=-\{\boldsymbol{g},\boldsymbol{\varphi}\}^{-1}\boldsymbol{\varphi}\\&\boldsymbol{\mu}=-\{\boldsymbol{\varphi},\boldsymbol{g}\}^{-1}[\{\boldsymbol{\varphi},H\}-\{\boldsymbol{\varphi},\boldsymbol{\varphi}\}\{\boldsymbol{g},\boldsymbol{\varphi}\}^{-1}\boldsymbol{\varphi}]\end{aligned}\right\} \tag{4.79}$$

那么，关于约束变分的微分方程为

$$\begin{aligned}\dot{\boldsymbol{g}}=\{\boldsymbol{g},H_{N2}\}=&\\&\boldsymbol{\varphi}+\{\boldsymbol{g},-\{\boldsymbol{\varphi},\boldsymbol{g}\}^{-1}[\{\boldsymbol{\varphi},H\}-\{\boldsymbol{\varphi},\boldsymbol{\varphi}\}\{\boldsymbol{g},\boldsymbol{\varphi}\}^{-1}\boldsymbol{\varphi}]\}\boldsymbol{g}+\\&\{\boldsymbol{g},-\{\boldsymbol{g},\boldsymbol{\varphi}\}^{-1}\boldsymbol{\varphi}\}\boldsymbol{\varphi}+\{\boldsymbol{g},\boldsymbol{\varphi}\}[-\{\boldsymbol{g},\boldsymbol{\varphi}\}^{-1}\boldsymbol{\varphi}]\end{aligned} \tag{4.80}$$

$$\begin{aligned}\dot{\boldsymbol{\varphi}}=\{\boldsymbol{\varphi},H_{N2}\}=&\\&\{\boldsymbol{\varphi},H\}+\{\boldsymbol{\varphi},-\{\boldsymbol{\varphi},\boldsymbol{g}\}^{-1}[\{\boldsymbol{\varphi},H\}-\{\boldsymbol{\varphi},\boldsymbol{\varphi}\}\{\boldsymbol{g},\boldsymbol{\varphi}\}^{-1}\boldsymbol{\varphi}]\}\boldsymbol{g}+\\&\{\boldsymbol{\varphi},\boldsymbol{g}\}[-\{\boldsymbol{\varphi},\boldsymbol{g}\}^{-1}(\{\boldsymbol{\varphi},H\}-\{\boldsymbol{\varphi},\boldsymbol{\varphi}\}\{\boldsymbol{g},\boldsymbol{\varphi}\}^{-1}\boldsymbol{\varphi})]+\\&\{\boldsymbol{\varphi},-\{\boldsymbol{g},\boldsymbol{\varphi}\}^{-1}\boldsymbol{\varphi}\}\boldsymbol{\varphi}+\{\boldsymbol{\varphi},\boldsymbol{\varphi}\}[-\{\boldsymbol{g},\boldsymbol{\varphi}\}^{-1}\boldsymbol{\varphi}]\end{aligned} \tag{4.81}$$

上式可简化为

$$\left.\begin{aligned}\dot{\boldsymbol{g}}=&-\{\boldsymbol{g},\{\boldsymbol{\varphi},\boldsymbol{g}\}^{-1}[\{\boldsymbol{\varphi},H\}-\{\boldsymbol{\varphi},\boldsymbol{\varphi}\}\{\boldsymbol{g},\boldsymbol{\varphi}\}^{-1}\boldsymbol{\varphi}]\}\boldsymbol{g}-\\&\{\boldsymbol{g},\{\boldsymbol{g},\boldsymbol{\varphi}\}^{-1}\boldsymbol{\varphi}\}\boldsymbol{\varphi}\\\dot{\boldsymbol{\varphi}}=&-\{\boldsymbol{\varphi},\{\boldsymbol{\varphi},\boldsymbol{g}\}^{-1}[\{\boldsymbol{\varphi},H\}-\{\boldsymbol{\varphi},\boldsymbol{\varphi}\}\{\boldsymbol{g},\boldsymbol{\varphi}\}^{-1}\boldsymbol{\varphi}]\}\boldsymbol{g}-\\&\{\boldsymbol{\varphi},\{\boldsymbol{g},\boldsymbol{\varphi}\}^{-1}\boldsymbol{\varphi}\}\boldsymbol{\varphi}\end{aligned}\right\} \tag{4.82}$$

根据命题 1,有

$$\left.\begin{aligned}
&\{\boldsymbol{g},\{\boldsymbol{g},\boldsymbol{\varphi}\}^{-1}\boldsymbol{\varphi}\}\boldsymbol{\varphi}= \\
&\qquad\{\boldsymbol{g},\{\boldsymbol{g},\boldsymbol{\varphi}\}^{-1}\}\boldsymbol{\varphi}^2+\{\boldsymbol{g},\boldsymbol{\varphi}\}\{\boldsymbol{g},\boldsymbol{\varphi}\}^{-1}\boldsymbol{\varphi}=\boldsymbol{\varphi}+O(\boldsymbol{\varphi}^2) \\
&\{\boldsymbol{g},\{\boldsymbol{\varphi},\boldsymbol{g}\}^{-1}\{\boldsymbol{\varphi},\boldsymbol{\varphi}\}\{\boldsymbol{g},\boldsymbol{\varphi}\}^{-1}\boldsymbol{\varphi}\}\boldsymbol{g}= \\
&\qquad\{\boldsymbol{g},\boldsymbol{\varphi}\}\{\boldsymbol{\varphi},\boldsymbol{g}\}^{-1}\{\boldsymbol{\varphi},\boldsymbol{\varphi}\}\{\boldsymbol{g},\boldsymbol{\varphi}\}^{-1}\boldsymbol{g}+O(\boldsymbol{g}\boldsymbol{\varphi}) \\
&\{\boldsymbol{\varphi},\{\boldsymbol{\varphi},\boldsymbol{g}\}^{-1}\{\boldsymbol{\varphi},\boldsymbol{\varphi}\}\{\boldsymbol{g},\boldsymbol{\varphi}\}^{-1}\boldsymbol{\varphi}\}\boldsymbol{g}= \\
&\qquad\{\boldsymbol{\varphi},\boldsymbol{\varphi}\}\{\boldsymbol{\varphi},\boldsymbol{g}\}^{-1}\{\boldsymbol{\varphi},\boldsymbol{\varphi}\}\{\boldsymbol{g},\boldsymbol{\varphi}\}^{-1}\boldsymbol{g}+O(\boldsymbol{g}\boldsymbol{\varphi}) \\
&\{\boldsymbol{\varphi},\{\boldsymbol{g},\boldsymbol{\varphi}\}^{-1}\boldsymbol{\varphi}\}\boldsymbol{\varphi}=\{\boldsymbol{\varphi},\boldsymbol{\varphi}\}\{\boldsymbol{g},\boldsymbol{\varphi}\}^{-1}\boldsymbol{\varphi}+O(\boldsymbol{\varphi}^2)
\end{aligned}\right\}\tag{4.83}$$

那么在约束流形的某邻域,约束变分的微分方程成为如下形式:

$$\left.\begin{aligned}
\dot{\boldsymbol{g}}&=[\{\boldsymbol{g},\boldsymbol{\varphi}\}\{\boldsymbol{\varphi},\boldsymbol{g}\}^{-1}\{\boldsymbol{\varphi},\boldsymbol{\varphi}\}\{\boldsymbol{g},\boldsymbol{\varphi}\}^{-1}- \\
&\qquad\{\boldsymbol{g},\{\boldsymbol{\varphi},\boldsymbol{g}\}^{-1}\{\boldsymbol{\varphi},H\}\}]\boldsymbol{g}-\boldsymbol{\varphi} \\
\dot{\boldsymbol{\varphi}}&=[\{\boldsymbol{\varphi},\boldsymbol{\varphi}\}\{\boldsymbol{\varphi},\boldsymbol{g}\}^{-1}\{\boldsymbol{\varphi},\boldsymbol{\varphi}\}\{\boldsymbol{g},\boldsymbol{\varphi}\}^{-1}- \\
&\qquad\{\boldsymbol{\varphi},\{\boldsymbol{\varphi},\boldsymbol{g}\}^{-1}\{\boldsymbol{\varphi},H\}\}]\boldsymbol{g}-\{\boldsymbol{\varphi},\boldsymbol{\varphi}\}\{\boldsymbol{g},\boldsymbol{\varphi}\}^{-1}\boldsymbol{\varphi}
\end{aligned}\right\}\tag{4.84}$$

这样,通过线性化至少在约束函数的稳定奇点的某邻域可以分析约束变分的稳定性。事实上,从该线性化系统的稳定性讨论,只能得出约束不会是指数不稳定的。

4.5　用投影技术求耗散广义 Hamilton 约束系统的李群积分

4.5.1　变约束方程为无约束方程

如 4.2 节所述,如果$\{\boldsymbol{g},\boldsymbol{g}\}=\boldsymbol{0}$,须有$\{\boldsymbol{g},H\}\approx\boldsymbol{0}$,必须考虑$\boldsymbol{\varphi}\equiv\{\boldsymbol{g},H\}=\boldsymbol{0}$是隐含的约束,则约束流形变为$\rho=\{\boldsymbol{x}:\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{0},\ \{\boldsymbol{g},H\}=\boldsymbol{0}\}$,Hamilton 函数变为$H_{N2}=H+\boldsymbol{\mu}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g}+\boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\varphi}$,要求$\boldsymbol{\mu}=\boldsymbol{\mu}(\boldsymbol{x})$和$\boldsymbol{\lambda}=\boldsymbol{\lambda}(\boldsymbol{x})$以保证$\{\boldsymbol{g},H_{N2}\}\approx\boldsymbol{0}$和$\{\boldsymbol{\varphi},H_{N2}\}\approx\boldsymbol{0}$,就必须有

$$\{\boldsymbol{g},H_{N2}\}=\boldsymbol{0}\Rightarrow\{\boldsymbol{g},H\}+\{\boldsymbol{g},\boldsymbol{\varphi}\}\boldsymbol{\lambda}=\boldsymbol{0}\tag{4.85}$$

$$\{\boldsymbol{\varphi},H_{N2}\}=\mathbf{0}\Rightarrow\{\boldsymbol{\varphi},H\}+\{\boldsymbol{\varphi},\boldsymbol{g}\}\boldsymbol{\mu}+\{\boldsymbol{\varphi},\boldsymbol{\varphi}\}\boldsymbol{\lambda}=\mathbf{0} \tag{4.86}$$

已假定 $\boldsymbol{\varphi}(\boldsymbol{x})\equiv\{\boldsymbol{g},H\}=\mathbf{0}$ 是隐含约束，由式(4.85) 可得 $\boldsymbol{\lambda}=\mathbf{0}$。进一步由式(4.86) 可得 $\boldsymbol{\mu}=-\{\boldsymbol{\varphi},\boldsymbol{g}\}^{-1}\{\boldsymbol{\varphi},H\}$。

根据上面的推理，原广义 Hamilton 约束系统又可变形为如下无约束广义 Hamilton 系统：

$$\dot{\boldsymbol{x}}=\{\boldsymbol{x},H_{N2}\} \tag{4.87}$$

或

$$\dot{\boldsymbol{x}}=\boldsymbol{D}_{H_{N1}}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{M}\frac{\partial H_{N1}}{\partial \boldsymbol{x}} \tag{4.88}$$

式中 $$H_{N1}=H+\boldsymbol{\mu}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g}=H-\{\boldsymbol{\varphi},H\}^{\mathrm{T}}\{\boldsymbol{\varphi},\boldsymbol{g}\}^{-\mathrm{T}}\boldsymbol{g}$$

4.5.2 用投影技术求广义 Hamilton 约束系统的李群积分

本节以式(4.62) 至式(4.63) 的变形形式即式(4.87) 或式(4.88) 作为无约束问题，将第三章的无约束系统的李群积分和投影技术相组合，给出原来约束系统的保持其约束不变性的李群积分法，即在保持约束流形不变的同时还保持原广义 Hamilton 系统的伪 Poisson 括号结构不变。广义 Hamilton 系统式(4.88) 的解可以形式地表示为

$$\boldsymbol{x}(t)=[\exp(t\boldsymbol{D}_{N1})]\boldsymbol{x}(0) \tag{4.89}$$

为了应用投影方法以保证约束不变性，先考虑如下命题：

命题 4.2 设 $\boldsymbol{\lambda}:\boldsymbol{R}^n\to\boldsymbol{R}^m$ 是 $\boldsymbol{x}$ 的任意矢量值函数，$\boldsymbol{g}=\mathbf{0}$，那么，下面的映射：

$$\bar{\boldsymbol{x}}=\boldsymbol{x}+h\boldsymbol{M}\left(\frac{\partial \boldsymbol{g}}{\partial \boldsymbol{x}}\right)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\lambda} \tag{4.90}$$

是源于 Hamilton 函数 $H=\boldsymbol{g}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\lambda}$ 的广义 Hamilton 系统的一个李群积分，其中 h 为时间步长。

证明 讨论其一阶近似：$\dfrac{\bar{\boldsymbol{x}}-\boldsymbol{x}}{h}=\boldsymbol{M}\left(\dfrac{\partial \boldsymbol{g}}{\partial \boldsymbol{x}}\right)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\lambda}+\boldsymbol{M}\left(\dfrac{\partial \boldsymbol{\lambda}}{\partial \boldsymbol{x}}\right)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g}$。考虑到等式 $\boldsymbol{g}=\mathbf{0}$，显然映射式(4.90) 是源于 Hamilton 函数 $H=\boldsymbol{g}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\lambda}$ 的广义 Hamilton 系统的一阶李群积分。

记$\dfrac{\partial \boldsymbol{g}}{\partial \boldsymbol{x}_k}=\dfrac{\partial \boldsymbol{g}}{\partial \boldsymbol{x}}(\boldsymbol{x}_k)$，对于变形所得的系统式(4.87)或式(4.88)，采用保持约束流形的积分方法。

第一步：

$$\bar{\boldsymbol{x}}_k=\boldsymbol{x}_k+\frac{h}{2}\boldsymbol{M}\left(\frac{\partial \boldsymbol{g}}{\partial \boldsymbol{x}_k}\right)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\lambda}_k \tag{4.91}$$

第二步：

$$\bar{\boldsymbol{x}}_{k+1}=[\exp(h\boldsymbol{D}_{H_{N1}})](\bar{\boldsymbol{x}}_k) \tag{4.92}$$

第三步：

$$\boldsymbol{x}_{k+1}=\bar{\boldsymbol{x}}_{k+1}+\frac{h}{2}\boldsymbol{M}\left(\frac{\partial \boldsymbol{g}}{\partial \bar{\boldsymbol{x}}_{k+1}}\right)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\lambda}_{k+1} \tag{4.93}$$

要求 $\boldsymbol{\lambda}_k$ 满足

$$\boldsymbol{\varphi}(\boldsymbol{x}_{k+1})=\{\boldsymbol{g},H\}=\boldsymbol{0} \tag{4.94}$$

及 $\boldsymbol{\lambda}_{k+1}$ 满足

$$\boldsymbol{\varphi}(\boldsymbol{x}_{k+1})=\{\boldsymbol{g},H\}=\boldsymbol{0} \tag{4.95}$$

如上所述的积分格式可以看做是源于 $H_N=H_{N1}+\boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g}=H+\boldsymbol{\mu}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g}+\boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g}$ 的广义 Hamilton 系统的积分。因为 $\boldsymbol{g}=\boldsymbol{0}$，变形系统式(4.87)又可以表示为如下无约束系统：

$$\dot{\boldsymbol{x}}=\{\boldsymbol{x},H_N\} \tag{4.96}$$

或

$$\dot{\boldsymbol{x}}=\boldsymbol{D}_{H_N}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{M}\frac{\partial H_N}{\partial \boldsymbol{x}} \tag{4.97}$$

我们可以把 $\boldsymbol{D}_N$ 分裂成两个广义 Hamilton 算子 $\boldsymbol{A}_1$ 和 $\boldsymbol{B}_1$，其中，

$$\boldsymbol{A}_1=\sum_{i,j=1}^{n}M_{ji}(\boldsymbol{x})\frac{\partial(\boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g})}{\partial x_i}\frac{\partial}{\partial x_j},\boldsymbol{B}_1=\sum_{i,j=1}^{n}M_{ji}(\boldsymbol{x})\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}}(H+\boldsymbol{\mu}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g})\frac{\partial}{\partial x_j},$$

分别通过李级数解法计算 $\exp(t\boldsymbol{A}_1)$ 和 $\exp(t\boldsymbol{B}_1)$，那么，应用对称合成积分法[7~8] 计算 $\boldsymbol{\Psi}_h=\exp(t\boldsymbol{D}_{H_N})$，即

$$\boldsymbol{\Psi}_h=\exp\left(\frac{h}{2}\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{g}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\lambda}_{k+1}}\right)\circ\exp(h\boldsymbol{D}_{H_{N1}})\circ\exp\left(\frac{h}{2}\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{g}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\lambda}_k}\right) \tag{4.98}$$

且满足

$$\boldsymbol{g} \circ \boldsymbol{\Psi}_h = \boldsymbol{\varphi} \circ \boldsymbol{\Psi}_h = 0 \tag{4.99}$$

则上面的积分法可以简单地表示为

$$\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{\Psi}_h \boldsymbol{x}_k \tag{4.100}$$

它是一个保约束的一阶李群积分。高阶积分格式可以通过 Yoshida 方法[7] 构造。

4.5.3 直接构造广义 Hamilton 约束系统李群积分的投影方法

我们还可以对原约束系统直接使用投影技术而简化 4.5.2 节中的积分法。那么，保持约束的李群积分法可以表示如下。

第一步：

$$\bar{\boldsymbol{x}}_k = \boldsymbol{x}_k + \frac{h}{2}\boldsymbol{M}\left(\frac{\partial \boldsymbol{g}}{\partial \boldsymbol{x}_k}\right)^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\lambda}_k \tag{4.101}$$

第二步：

$$\bar{\boldsymbol{x}}_{k+1} = [\exp(h\boldsymbol{D}_H)]\bar{\boldsymbol{x}}_k \tag{4.102}$$

第三步：

$$\boldsymbol{x}_{k+1} = \bar{\boldsymbol{x}}_{k+1} + \frac{h}{2}\boldsymbol{M}\left(\frac{\partial \boldsymbol{g}}{\partial \bar{\boldsymbol{x}}_{k+1}}\right)^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\lambda}_{k+1} \tag{4.103}$$

要求 $\boldsymbol{\lambda}_k$ 满足

$$\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}_{k+1}) = \boldsymbol{0} \tag{4.104}$$

及 $\boldsymbol{\lambda}_{k+1}$ 满足

$$\boldsymbol{\varphi}(\boldsymbol{x}_{k+1}) = \{\boldsymbol{g}, H\} = \boldsymbol{0} \tag{4.105}$$

因 $\boldsymbol{g} = \boldsymbol{0}$，该积分格式可以看做源于 Hamilton 函数 $\widetilde{H} = H + \boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g}$ 的广义 Hamilton 系统的积分，保证了积分格式属于原系统的李群，经过投影同时满足了约束不变性。

4.6 算 例

【例】 考虑广义 Hamilton 系统：

$$\dot{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{M}(\boldsymbol{x}) \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{x}}$$

满足约束：

$$g(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2}(x_1^2 + x_2^2 - 1) = 0$$

式中

$$\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, x_3, x_4)^{\mathrm{T}} \in \boldsymbol{R}^4$$

$$H = \frac{1}{2}(x_3^2 + x_4^2)$$

$$\boldsymbol{M} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

根据 4.3 节所述方法处理问题，其修正的 Hamilton 函数为

$$H_{N2}(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2}(x_3^2 + x_4^2) + \frac{1}{2}(x_1^2 + x_2^2 - 1)$$
$$\frac{(x_3^2 + x_4^2)(x_1^2 + x_2^2) + (x_1 x_3 + x_2 x_4) x_2 x_4}{(x_1^2 + x_2^2)(x_1^2 + 2x_2^2)} -$$
$$\frac{(x_1 x_3 + x_2 x_4)^2}{x_1^2 + x_2^2}$$

及相应的常微分方程为

$$\dot{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{M} \frac{\partial H_{N2}}{\partial \boldsymbol{x}}$$

关于 g 和 φ 的微分方程为

$$\dot{g} = \frac{x_2 x_4}{x_1^2 + 2x_2^2} g - \varphi$$

$$\dot{\varphi} = \left[\frac{(x_3^2 + x_4^2)(4x_1^2 + 12x_2^2)}{(x_1^2 + 2x_2^2)^2} - \frac{x_2^2 x_4^2}{(x_1^2 + 2x_2^2)(x_1^2 + x_2^2)}\right] g +$$
$$\frac{x_2 x_4}{x_1^2 + x_2^2} \varphi$$

可见，仅当 $x_2 x_4 \leqslant 0$ 时，约束不变量是稳定的。设该广义 Hamilton

约束系统的初始条件为$(x_1, x_2, x_3, x_4) = (1, 0, 0, -0.15)$，用一阶李群积分格式求解。原约束系统的约束变分的数值结果如图4.1所示。另外用 4.4.2 节所述的一阶积分格式求解该广义 Hamilton 约束系统。其约束不变量的误差如图 4.2 所示（时间步长均取为$h = 0.1$）。

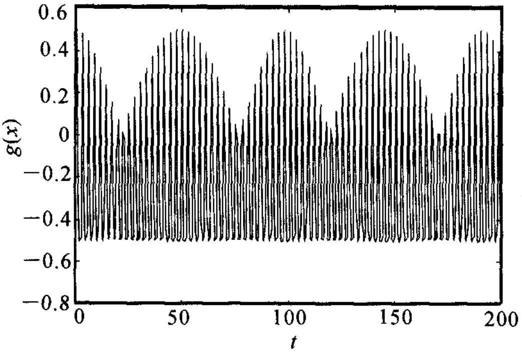


图 4.1　约束不变量 $g(x) = 0$ 的误差

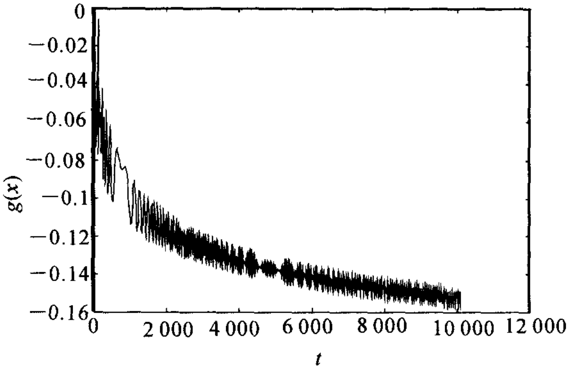


图 4.2　约束不变量 $g(x) = 0$ 的误差

4.7 本章小结

本章把带有光滑约束的耗散广义 Hamilton 系统看做约束流形上的广义 Hamilton 系统。为数值计算方便，在欧几里得空间构造了保持约束流形为不变流形的常微分方程系统，进而把广义 Hamilton 约束系统化为无约束的常微分方程系统，而后应用第三章的积分方法构造了保持广义 Hamilton 约束系统伪 Poisson 括号结构的李群积分法。进一步对约束不变量的稳定性进行了理论分析和数值分析。另外，结合投影方法构造李群算法也是保持约束不变性的一个很好的途径，向约束流形投影时要引入拉格朗日乘子来保持原动力学系统的李群性质。最后，为进一步简化积分过程，对原广义 Hamilton 约束系统直接应用投影方法进行了积分。数值实验显示该方法是有效的。本章的讨论对完整与非完整约束不加区分，所以也适用于非完整约束系统的情形。

参考文献

1 Sanz-Serna J M. Runge-Kutta schemes for Hamiltonian systems. BIT, 1988, 28: 877 ~ 883

2 Blanes S, Cacas F, Ros J. Symplectic integrators with processing: A general study. SIAM J. Sci. Comput. 1999, 21:711 ~ 725

3 Okunbor D, Skeel R D. Explicit canonical methods for Hamiltonian systems. Math. Comput. 1992, 59: 439 ~ 455

4 Candy J, Rozmus W. A symplectic integration algorithm for separable Hamiltonian functions. J. Comput. Phys. 1991, 92: 230 ~ 256

5 Cary J. R, Doxas J. An explicit symplectic integration scheme for plasma simulations. J. Comput. Phys. 1993, 107: 98 ~ 104

6 Forest E. Sixth-order Lie group integrators. J. Comput. Phys. 1992, 99: 209 ~ 213

7 Yoshida H. Construction of higher order symplectic integrators. Physics Letters A, 1990, 150: 262 ~ 268

8 McLachlan R I. On the numerical integration of ordinary differential equations by symmetric composition methods. SIAM J. Sci. Comput. 1995, 16: 151 ~ 168

9 朱位秋，黄志龙. 随机激励的耗散的 Hamilton 体系理论的研究进展. 力学进展，2000, 30(4): 481 ~ 494

10 程代展，卢强. 广义 Hamilton 控制系统的几何结构及其应用. 中国科学 (E 辑)，2000, 30(4): 341 ~ 355

11 Leimkuhler B, Reich S. Symplectic integration of constrained Hamiltonian systems. Math. Comp. 1994, 63: 589 ~ 605

12 Reich S. Symplectic integration of constrained Hamiltonian systems by composition methods. SIAM J. Numer. Anal. 1996, 33(2): 475 ~ 491

13 Leimkuhler B, Skeel R D. Symplectic numerical integrators in constrained Hamiltonian systems. J. Comput. Phys. 1994, 112: 117 ~ 125

14 Reich S. Symplectic integration of constrained Hamiltonian systems by Runge-Kutta methods. Tech. Report 93 ~ 13, Dept. of Comput. Sci., University of British Columbia

第五章　流形上微分方程的解法及李群理论

5.1　引　　言

李群理论是由Sophus Lie研究微分方程组的积分而发展起来的。它首先作为变换群出现，现在被当做抽象群来研究。本章将扼要地介绍流形和李群的一些基本概念和理论。

下面先来看变换群是如何从研究微分方程组

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{x}}{\mathrm{d}t} = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) \tag{5.1}$$

而引起的。这里 $\boldsymbol{x}$ 是实 n 维欧几里得空间内一点。取 $n = 3$，方程组式(5.1)可解释为：一流体在空间运动，流体中指点在 $\boldsymbol{x}$ 处的速度有分量 $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x})$。假定在 $t = 0$ 时流体的一质点在 $\boldsymbol{x}$ 处，那么要问：随后 $t > 0$ 时它的位置如何？这将从解方程组式(5.1)而得到答案，其形式为

$$\boldsymbol{x}' = \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}, t) \tag{5.2}$$

将式(5.2)想像为定义在整个空间内的一变换，对于每点 $\boldsymbol{x}$，有一点 $\boldsymbol{x}'$ 和它联系，$\boldsymbol{x}'$ 就是最初在 $\boldsymbol{x}$ 的流体经过时间 t 后所到达的位置。将其写为

$$\boldsymbol{x}' = S_t\boldsymbol{x}$$

因而 S_t 是空间的一族变换。容易看出，这些变换构成一个群(假定方程组式(5.1)对所有的 $\boldsymbol{x}$ 可以积分)，即对任何点 $\boldsymbol{x}$，有

$$S_tS_{t'}\boldsymbol{x} = S_{t+t'}\boldsymbol{x},\ S_0\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x},\ S_tS_{-t}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}$$

若把这变换群当做抽象群看待，它与实数加法群同构。它发生的方式突出地表现了它的某些特征：

(1) 乘积 $S_tS_{t'}$ 代表的变换的附标可写成两个变量的函数，即

$$\varphi(t,\ t') = t + t'$$

此函数是连续和可微的。

(2) 若将式(5.1) 写为

$$\delta \boldsymbol{u} = \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x})\delta t$$

它便能当成“无穷小变换”，即

$$\boldsymbol{x} \to \boldsymbol{x} + \delta \boldsymbol{x} \tag{5.3}$$

并且每个 S_t 可设想是由无穷小变换即式(5.3) 累次重复构成的。这意味着，在某种意义下，我们的群类似于循环群，式(5.3) 是此群的(无穷小) 生成元素。

(3) 为了得到一变换群，必须假定对 x 的一切值，方程组式(5.1) 都有解。但在一般情况，这并不一定可能，这时候，我们得到的不是一个变换群，而是群的一部分。

根据这些事实，可以预料李群的若干特性。例如在群内，或至少在它的一部分内，能引入一个坐标系，使得在这个坐标系上，群的乘法规律能用可微的函数来表示。由于该坐标系不一定处处适用，最方便的方法，是假定我们的群是一个拓扑空间，群的运算在这空间内是连续的，即是说，它是一个拓扑群；此外，在单位元素的某领域内，已定义一个坐标系。于是能证明，虽然不一定存在一个坐标系对整个群适用，但至少在每点的某一领域内，可定义一个坐标系。

在拓扑群内，犹如在每一个拓扑空间一样，可以区别局部性质和整体性质。前者如局部紧致性和局部连通性，而后者就整体空间来考虑。对李群来说，我们还能由局部深入到无穷小范围内。例如，能够证明，变换李群是由有限个无穷小变换生成的。当李群只是抽象地给出时，它能看做是在自身上进行右移动的变换群。

用无穷小变换来代替有限变换，是为了将问题线性化，这样，群中两元素的乘积对应于两无穷小变换之和，因而后者组成一线性空间。若考虑群中两元素的交换子 $\boldsymbol{x}^{-1}\boldsymbol{y}^{-1}\boldsymbol{x}\boldsymbol{y}$，便得到另一种运

算,它相当于无穷小变换的一种乘法。对这个乘法来说,无穷小变换组成一个非组合线性代数,此即所谓的李代数。

5.2 流 形

流形是三维欧氏空间中的曲线和曲面概念的推广,一般地说,流形就是局部看似欧氏空间而全局特征不全相同的拓扑空间,流形的严格定义如下。

定义 5.1 一个 m 维流形是满足以下条件的集合 M:存在可数多个称为坐标卡(或图集)的子集合族 $U_\alpha \subset M$,以及映到 $\boldsymbol{R}^m$ 的连通开子集 V_α 上的一对一映射 $\varphi_\alpha: U_\alpha \to V_\alpha$,$\varphi_\alpha$ 称为局部坐标映射,其满足如下条件:

(1) 坐标卡覆盖 M,即 $\bigcup_\alpha U_\alpha = M$;

(2) 若 $U_\alpha \cap U_\beta \neq \varphi$,则 $\varphi_\beta \circ \varphi_\alpha^{-1}: \varphi_\alpha(U_\alpha \cap U_\beta) \to \varphi_\beta(U_\alpha \cap U_\beta)$ 是光滑函数;

(3) 若 $\boldsymbol{x} \in U_\alpha$, $\tilde{\boldsymbol{x}} \in U_\beta$ 是 M 的两个不同点,则存在开子集 $W \subset V_\alpha$, $\widetilde{W} \subset V_\alpha$, $\varphi_\alpha(\boldsymbol{x}) \in V_\alpha$, $\varphi_\beta(\tilde{\boldsymbol{x}}) \in V_\beta$,使得 $\varphi_\alpha^{-1}(W) \cap \varphi_\beta^{-1}(\widetilde{W}) = \varnothing$。

条件(3) 也称为 Hausdorff 分离性质,利用图 5.1 有助于理解流形的定义。

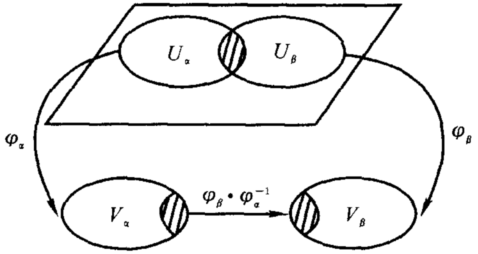


图 5.1 流形

为了正确理解流形的一般定义，现举几个最简单的基本例子加以说明。

【例 5.1】 最简单的 m 维流形就是欧氏空间 $\boldsymbol{R}^m$ 自身。此时只需一个坐标卡 $U=\boldsymbol{R}^m$，恒同映射 $\varphi=\boldsymbol{I}:\boldsymbol{R}^m\to\boldsymbol{R}^m$ 作为坐标映射。更一般地，$\boldsymbol{R}^m$ 的任意开子集都是一个 m 流形。

【例 5.2】 单位球面

$$S^2=\{(x,y,z)\mid x^2+y^2+z^2=1\}$$

是一个二维流形。实际上，令

$$U_1=S^2\backslash\{(0,0,1)\},\quad U_2=S^2\backslash\{(0,0,-1)\}$$

则 $\varphi_\alpha:U_\alpha\to\boldsymbol{R}^2\simeq\{(x,y,0)\}$，$\alpha=1,2$，分别是从南北极的球极投影，即

$$\varphi_1(x,y,z)=\left(\frac{x}{1-z},\frac{y}{1-z}\right)$$

$$\varphi_2(x,y,z)=\left(\frac{x}{1+z},\frac{y}{1+z}\right)$$

容易证明，在交集 $U_1\cap U_2$ 上，传递映射

$$\varphi_1\circ\varphi_2^{-1}:\boldsymbol{R}^2\backslash\{0\}\to\boldsymbol{R}^2\backslash\{0\}$$

是一个光滑的微分同胚，即

$$\varphi_1\circ\varphi_2^{-1}(x,y)=\left(\frac{x}{x^2+y^2},\frac{y}{x^2+y^2}\right)$$

定义中的条件(3) 可以从 $\boldsymbol{R}^3$ 的性质得出。

【例 5.3】 单位圆

$$S^1=\{(x,y)\mid x^2+y^2=1\}$$

是一个具有两个坐标卡的一维流形。更一般地，m 个 S^1 的 Descartes 积，即

$$T^m=S^1\times S^1\times\cdots\times S^1$$

是一个 m 维流形，称为 m 维环面。

定义 5.2 设 M 和 N 是两个光滑流形，$F:M\to N$ 是一个映射。如果 F 在每个坐标卡上的局部坐标表示都是光滑的，则称 F 是

光滑映射。即对 M 上的每个坐标卡 $\varphi_\alpha: U_\alpha \to V_\alpha \subset \boldsymbol{R}^m$ 和 N 上的每个坐标卡 $\widetilde{\varphi}_\beta: \widetilde{U}_\beta \to \widetilde{V}_\beta \subset \boldsymbol{R}^n$，复合映射

$$\widetilde{\varphi}_\beta \circ F \circ \varphi_\beta^{-1}: \boldsymbol{R}^m \to \boldsymbol{R}^n$$

在有定义的地方（即在子集 $\varphi_\alpha[U_\alpha \cap F^{-1}(\widetilde{U}_\beta)]$ 上）是光滑的。

【例 5.4】 证明环面 $\boldsymbol{T}^2$ 可以光滑地映射到 $\boldsymbol{R}^3$ 中。实际上，定义 $F: \boldsymbol{T}^2 \to \boldsymbol{R}^2$：

$$F(\theta, \rho) = ((\sqrt{2} + \cos\rho)\cos\theta,\ (\sqrt{2} + \cos\rho)\sin\theta, \sin\rho)$$

则 F 显然关于 θ 和 ρ 是光滑的，并且是一一映射。

定义 5.3 设 $F: M \to N$ 是 m 维流形 M 到 n 维流形 N 的光滑映射。F 在点 $\boldsymbol{x} \in M$ 的秩就是 $n \times m$ 的 Jacobi 矩阵 $\left(\dfrac{\partial F^i}{\partial x^j}\right)$ 在 $\boldsymbol{x}$ 的秩，其中 $\boldsymbol{y} = F(\boldsymbol{x})$ 是 $\boldsymbol{x}$ 附近的任意方便的局部坐标表示。如果对子集 $S \subset M$ 中的每点，F 的秩都等于 m 和 n 中最小者，则称 F 在 S 上有最大秩。

容易验证 F 在点 $\boldsymbol{x}$ 的秩并不依赖于特定的局部坐标。

定理 5.1 若 $F: M \to N$ 在 $\boldsymbol{x}_0 \in M$ 处有最大秩，则存在 $\boldsymbol{x}_0$ 附近的局部坐标 $\boldsymbol{x} = (x^1, \cdots, x^m)$ 和 $\boldsymbol{y}_0 = F(\boldsymbol{x}_0)$ 附近的局部坐标 $\boldsymbol{y} = (y^1, \cdots, y^n)$，使得 F 在这些坐标下有简单的形式，即

$$\boldsymbol{y} = (x^1, \cdots, x^m, 0, \cdots, 0), \quad n > m$$

或

$$\boldsymbol{y} = (x^1, \cdots, x^n), \quad n \leqslant m$$

这个定理很容易由隐函数定理推出。

下面引入子流形的概念。

定义 5.4 设 M 是光滑流形，N 是 M 的子集。如果存在流形 $\widetilde{N}$ 和光滑一一映射 $\varphi: \widetilde{N} \to N \subset M$，其处处满足最大秩条件，则称 N 是 M 的子流形，$\widetilde{N}$ 叫做参数空间，并且 $N = \varphi(\widetilde{N})$。特别地，$N$ 的维数与 $\widetilde{N}$ 相同，并且不会超过 M 的维数。

映射 φ 通常称为浸入(immersion)，而 N 叫做浸入子流形。

除了上述浸入子流形的定义外，还有几种定义子流形的方式。

定义 5.5　若流形 M 的子集 N 是定义 5.4 意义下的子流形，由 $\varphi:\widetilde{N}\to M$ 参数化，而且对 N 中每点 $\boldsymbol{x}$ 都存在 $\boldsymbol{x}$ 在 M 中的任意小开邻域 U，使得集合 $\varphi^{-1}[U\cap N]$ 是 $\widetilde{N}$ 的连通开子集，则称 N 是 M 的正则(regular) 子流形。

利用定理 5.1 可以得到某种正规性的局部坐标刻画。

定理 5.2　n 维子流形 $N\subset M$ 是正则子流形的充分必要条件是：对任意 $\boldsymbol{x}_0\in N$，存在定义在 $\boldsymbol{x}_0$ 的邻域 U 上的局部坐标 $\boldsymbol{x}=(x^1,\cdots,x^m)$，使得

$$N\cap U=\{\boldsymbol{x}\mid x^{n+1}=\cdots=x^m=0\}$$

定理 5.2 中的坐标卡叫做 M 上的平坦(flat) 坐标卡。

子流形还可以用一个光滑函数来隐式地定义。例如，若 $F:\boldsymbol{R}^3\to\boldsymbol{R}$ 是一个光滑函数，而且在集合 $S=\{(x,y,z)\mid F(x,y,z)=0\}$ 上，F 的梯度$\nabla F=(F_x,F_y,F_z)$ 不等于零，那么根据隐函数定理，可以证明 S 是 $\boldsymbol{R}^3$ 的二维子流形，这样定义的子流形叫做隐式定义的子流形。

定理 5.3　若 M 是 m 维流形，$F:M\to\boldsymbol{R}^n(n\leqslant m)$ 是光滑映射。如果 F 在子集 $N=\{\boldsymbol{x}\mid F(\boldsymbol{x})=0\}$ 上有最大秩，那么 N 是一个正则的 $m-n$ 维子流形。

下面给出光滑流形 M 上的曲线的定义。

定义 5.6　对于光滑映射 $\varphi:I\to M$，其中 $I\subset R$ 是子区间，φ 的像集 $C=\varphi(I)\subset M$ 称为 M 上的一条曲线。在局部坐标下，C 由 m 个函数 $\varphi(t)=(\varphi^1(t),\cdots,\varphi^m(t))$ 确定。

注意，在定义中并没有要求 φ 是一对一的，因此 C 可以自交，它比一维子流形更一般。

5.3　李　　群

李群是群这一代数概念与流形这一几何概念相结合的产物。

这两个看似互不相干的数学概念的相互渗透与交叉产生了李群这一新的数学理论。在引入李群概念之前，先复习一下群的定义。

定义 5.7　集合 G 称为群，倘若对 G 的元素定义一个群运算，称为乘法运算，满足下面的条件：

(1) 封闭性：若 $g,h \in G$，则 $g \circ h \in G$；

(2) 结合律：$g \circ (h \circ k) = (g \circ h) \circ k,\ g,h,k \in G$；

(3) 存在单位元 $e \in G$，使得 $e \circ g = g = g \circ e$，对于一切 $g \in G$；

(4) 存在逆元素，即对于一切 $g \in G$，存在 $g^{-1} \in G$，使得

$$g \circ g^{-1} = e = g^{-1} \circ g$$

以下是一些常见的群的例子。

【例 5.5】　取 $G = \mathbf{Z}$(整数集合)，群运算定义为通常的整数加法，则 G 显然是一个群，其单位元是 0，而整数 $x \in G$ 的逆元是 $-x$。类似地，取 $G = \mathbf{R}$(全体整数)，则在实数加法的群运算下，G 也是一个群。

上述两种群的运算还满足交换律：对于一切 $g,h \in G$，

$$g \circ h = h \circ g$$

这样的群称为交换群或可交换群。

【例 5.6】　设 $G = GL(n,\boldsymbol{Q})$ 是元素为有理数的一切 $n \times n$ 可逆矩阵的集合，矩阵乘法为群运算，则 $GL(n,\boldsymbol{Q})$ 也是一个群，其单位元是单位矩阵，逆元素就是通常的逆矩阵。

类似地，设 $G = GL(n,\boldsymbol{R})$ 是具有实数元素的一切 $n \times n$ 可逆矩阵的集合，在矩阵乘法下，$GL(n,\boldsymbol{R})$ 是一个群，称为一般线性群，简记为 $GL(n)$。

定义 5.8　若群 G 具有 r 维光滑流形结构，使得群运算

$$m: G \times G \to G, m(g,h) = g \circ h,\ g,h \in G$$

和逆元运算

$$i: G \to G,\ i(g) = g^{-1},\ g \in G$$

是流形间的光滑映射，则称 G 为 r 参数李群。

由定义 5.8 可见，李群与一般群的区别在于它具有光滑流形结构，因此李群的元素可以连续变化。在例 5.5 与例 5.6 中，$\boldsymbol{Z}$ 和 $GL(n,\boldsymbol{Q})$ 都不可能是李群，因为有理数不是连续变化的，而 $\boldsymbol{R}$，$GL(n,\boldsymbol{R})$ 都是李群，因为 $\boldsymbol{R}$ 显然具有流形结构，对于一般线性群 $GL(n,\boldsymbol{R})=\{\boldsymbol{X}\in M_{n\times n}\mid \det\boldsymbol{X}\neq 0\}$，它是一切 $n\times n$ 矩阵空间 $M_{n\times n}$ 的开子集。若取 $\boldsymbol{X}$ 的元素 x_{ij} 为坐标，则 $M_{n\times n}$ 与 $\boldsymbol{R}^{n^2}$ 同构，从而 $GL(n)$ 是一个 n^2 维流形，并且是光滑的。

除了上述两个李群例子外，还有一些常见的李群。

【例 5.7】 $G=\boldsymbol{R}^r$，显然 $\boldsymbol{R}^r$ 具有光滑流形结构，而且向量加法的群运算 $(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})\to\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}$ 和向量 $\boldsymbol{x}$ 的逆元是 $-\boldsymbol{x}$，这两种运算都是光滑的，因此 $\boldsymbol{R}^r$ 是 r 参数可交换李群。

【例 5.8】 $G=SO(2)$ 为平面旋转群，换言之

$$G=\left\{\begin{bmatrix}\cos\theta & -\sin\theta\\ \sin\theta & \cos\theta\end{bmatrix}\middle|\ 0\leqslant\theta<2\pi\right\}$$

其中，θ 表示旋转角。另一方面 G 可以和 R^2 中的单位圆 $S'=\{(\cos\theta,\ \sin\theta)\mid 0\leqslant\theta<2\pi\}$ 等同，从而通过 S' 定义 $SO(2)$ 上的光滑流形结构。

如果把反射变换也包含在 $SO(2)$ 中，就得到平面正交群，即

$$O(2)=\{\boldsymbol{X}\in GL(2)\mid \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}=\boldsymbol{I}\}$$

其中，$\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$ 表示 $\boldsymbol{X}$ 的转置。$O(2)$ 是不连通单参数李群，其流形结构由两个不连通的 S' 的流形结构组成。

更一般地，可以证明，一切 $n\times n$ 实正交矩阵的群 $O(n)=\{\boldsymbol{X}\in GL(n)\mid \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}=\boldsymbol{I}\}$ 是一个 $\frac{1}{2}n(n-1)$ 参数李群，而 $O(n)$ 的子群 $SO(n)$（特殊正交群）为

$$SO(n)=\{\boldsymbol{X}\in GL(n)\mid \det\boldsymbol{X}=1\}$$

它是 $\frac{1}{2}n(n-1)$ 参数的连通李群。

容易证明，如果 G 和 H 分别是 r 和 s 参数李群，那么它们的 Descartes 积 $G\times H$ 是一个 $(r+s)$ 参数李群，其群运算为 $(g,h)\circ(\tilde{g},\tilde{h})=(g\circ\tilde{g},\ h\circ\tilde{h})$，$g,\tilde{g}\in G$，$h,\tilde{h}\in H$。因此 r 维环面 T^r 作为 r 个李群 $S'\simeq SO(2)$ 的 Descartes 积也是一个李群。而且可以证明 T^r 是一个连通紧致的可交换 r 参数李群。实际上，在同构意义下，具有上述性质的李群必为 T^r。

从前面的例子可以看出，一些李群是另一些更大李群的子群，比如 $SO(n)$ 是 $O(n)$ 的子群，而 $O(n)$ 又是 $GL(n)$ 的子群。与浸入子流形相对应，在此有必要引入李子群的定义。

定义 5.9　李群 G 的子集 H 叫做李子群，如果 H 是 G 的（浸入）子流形，即 $\varphi:\widetilde{H}\to G$，$H=\varphi(\widetilde{H})$，$\widetilde{H}$ 是李群，φ 是李群上的同态映射。

例如，若 ω 是任一实数，则易知，子流形

$$H_\omega=\{(t,\omega t)\bmod 2\pi : t\in R\}\subset T^2$$

是 T^2 的单参数李子群。当 ω 为有理数时，H_ω 同构于 $SO(2)$，形成 T^2 的闭的正则子群；而当 ω 为无理数时，H_ω 与李群 R 同构，在 T^2 中稠。

由定义 5.9 可知，李群的李子群不一定是正则子流形。下面的定理为我们提供了一个检验正则子流形的方法。

定理 5.4　若 G 是李群，H 是 G 的闭子群，那么 H 是 G 的正则子流形，因此 H 本身也是一个李群。反之，G 的任何正则李子群必为闭子群。

利用定理 5.4，容易证明 $O(n)$ 是 $GL(n)$ 的正则李子群，而 $SO(n)$ 是 $O(n)$ 的正则李子群。

在实际应用中，有时只需要考虑李群的单位元附近的元素，而不必对整个李群进行研究。因此需要引入局部李群的概念。

定义 5.10　所谓 r 参数局部李群，由包含原点 O 的连通开子集 $V_O\subset V\subset \boldsymbol{R}^r$ 和定义群运算的光滑映射 $m:V\times V\to\boldsymbol{R}^r$，以及

定义群的逆元运算的光滑映射 $i:V_O \to V$ 构成，并且满足下列条件：

(1) 结合律：若 $\boldsymbol{x},\boldsymbol{y},\boldsymbol{z} \in V$ 且 $m(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})$, $m(\boldsymbol{y},\boldsymbol{z}) \in V$，则 $m(\boldsymbol{x}, m(\boldsymbol{y},\boldsymbol{z})) = m(m(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}),\boldsymbol{z})$；

(2) 单位元：对于一切 $\boldsymbol{x} \in V$，有 $m(\boldsymbol{0},\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x} = m(\boldsymbol{x},\boldsymbol{0})$；

(3) 逆元：对每个 $\boldsymbol{x} \in V_O$，有 $m(\boldsymbol{x},i(\boldsymbol{x})) = \boldsymbol{0} = m(i(\boldsymbol{x}),\boldsymbol{x})$。

注意，上述局部李群定义是通过群运算的局部坐标表示来描述的，没有用到抽象的流形理论，因为流形在局部范围内与欧几里得空间等同。

下面举例说明，局部李群不一定是全局李群。

【例 5.9】 取 $V = \{x \mid |x| < 1\} \subset \boldsymbol{R}$，群运算为

$$m(x,y) = \frac{2xy - x - y}{xy - 1}, \quad x,y \in V$$

通过直接计算可证结合律和单位元对 m 都成立，而逆元映射是 $i(x) = \dfrac{x}{2x-1}$，它仅在 $V_O = \left\{x \mid |x| < \dfrac{1}{2}\right\}$ 上定义。从而 (V,m,i) 仅定义一个单参数局部李群。

对于给定的全局李群，可以利用包含单位元的局部坐标卡来构造局部李群。每个局部李群局部地与某个全局李群的单位元的邻域同构。

定理 5.5 设 $V_O \subset V \subset \boldsymbol{R}^r$ 是局部李群，而 $m(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})$ 和 $i(\boldsymbol{x})$ 分别是它的群运算和逆元映射，则存在一个全局李群 G 和包含其单位元的坐标卡 $\varphi:U^* \to V^*$，其中单位元 $\boldsymbol{e} \in U^*$，使得 $V^* \subset V_O$，$\varphi(\boldsymbol{e}) = 0$，并且对一切 $g,h \in U^*$，以下两式成立：

$$\varphi(g \circ h) = m(\varphi(g),\ \varphi(h))$$
$$\varphi(g^{-1}) = i(\varphi(g))$$

此外，存在惟一的具有上述性质的单连通李群 G^*。如果 G 是另一个这样的李群，则存在一个覆盖映射 $\pi:G^* \to G$，它同时是一

个群同态，使得 G^* 和 G 是局部同构李群(G^* 称为 G 的单连通覆盖群)。

上述定理保证了全局李群的存在。因此我们可以利用确定局部李群的单位元邻域的知识，来重新构造全局李群。精确地说，由 G 的连通性，可以证明下面的结果。

命题 5.1　设 G 是一个连通李群，$U \subset G$ 是其单位元的某邻域。记 $U^k \equiv \{g_1 \circ g_2 \circ \cdots \circ g_k \mid g_i \in U\}$ 为 U 中元素的 k 重乘积的集合，则等式

$$G = \bigcup_{k=1}^{\infty} U^k$$

成立。换言之，G 中的每个元素都可以写成 U 中的有限个元素的积。

在实际应用中，李群并不以抽象的概念出现，它常常是某个流形上的具体的变换群，例如，李群 $SO(2)$ 是平面 $M = \boldsymbol{R}^2$ 上的旋转群，而 $GL(n)$ 是 $\boldsymbol{R}^n$ 上的可逆线性变换群。

一般地说，对于李群 G，倘若对于它的每个元素 g，恒存在某个流形 M 到自身的映射与之对应，那么该李群 G 就可以作为 M 的变换群。在实际应用中，李群的作用仅仅是局部的，即群变换不对一切群元素或流形上的一切点定义。

定义 5.11　设 M 是光滑流形。所谓作用在 M 上的局部变换群由三元组(G,U,Ψ)确定，其中 G 是(局部)李群，U 是 $G \times M$ 中满足包含关系 $\{e\} \times M \subset U \subset G \times M$ 的开子集(称为群作用的定义域)，而 $\Psi: U \to M$ 是满足下列性质的光滑映射：

(1) 如果$(h,\boldsymbol{x}) \in U$，$(g,\Psi(h,\boldsymbol{x})) \in U$ 且$(g \circ h,\boldsymbol{x}) \in U$，那么

$$\Psi(g,\Psi(h,\boldsymbol{x})) = \Psi(g \circ h,\boldsymbol{x}) \tag{5.4}$$

(2) 对一切 $\boldsymbol{x} \in M$，有

$$\Psi(e,\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x} \tag{5.5}$$

(3) 如果$(g,\boldsymbol{x}) \in U$，则$(g^{-1},\Psi(g,\boldsymbol{x})) \in U$ 且

$$\Psi(g^{-1},\Psi(g,\boldsymbol{x}))=\boldsymbol{x} \tag{5.6}$$

为简便起见，把 $\Psi(g,\boldsymbol{x})$ 简记为 $g\circ\boldsymbol{x}$。这样，定义中的三个条件可以简化为

(1) $g\circ(h\circ\boldsymbol{x})=(g\circ h)\circ\boldsymbol{x},\ g,h\in G,\ \boldsymbol{x}\in M$； (5.7)

(2) 对一切 $\boldsymbol{x}\in M$，有 $e\circ\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}$； (5.8)

(3) $g^{-1}\circ(g\circ\boldsymbol{x})=\boldsymbol{x},\ g\in G,\ \boldsymbol{x}\in M$。 (5.9)

当然，在上述等式两端有定义的情况下，式(5.7) 至式(5.9) 才有意义。

在应用中，下面两个与变换群有关的集合很重要，即

$$G_x\equiv\{g\in G\mid(g,\boldsymbol{x})\in U\},\quad \boldsymbol{x}\in M\text{ 固定}$$

$$M_g\equiv\{\boldsymbol{x}\in M\mid(g,\boldsymbol{x})\in U\},\quad g\in U\text{ 固定}$$

容易证明，G_x 是一个局部李群，而 M_g 是 M 的开子流形。

定义 5.12 作用在 M 上的变换群 G 叫做连通的，若下列条件成立：

(1) G 是连通李群，M 是连通流形；

(2) $U\subset G\times M$ 是连通开集；

(3) 对每个 $\boldsymbol{x}\in M$，局部李群 G_x 是连通的。

在后文的叙述中，除非特别声明，都假定所有的局部变换群在上述意义下是连通的。

下面引入在理论和应用研究中都具有重要地位的局部变换群的轨道的概念。

定义 5.13 局部变换群 G 在 M 上的轨道就是 M 的满足以下条件的子集 $O\subset M$：

(1) 若 $\boldsymbol{x}\in O,\ g\in G$ 且 $g\circ\boldsymbol{x}$ 有定义，则 $g\circ\boldsymbol{x}\in O$；

(2) 若 $\tilde{O}\subset O$ 且满足条件(1)，则 $\tilde{O}=O$ 或 $\tilde{O}$ 为空集。简言之，G 的轨道就是 M 在 G 作用下不变的极小非空子集。

在全局变换群情形，对每个 $\boldsymbol{x}\in M$，都有一条群轨道通过它，即

$$O_x=\{g\circ\boldsymbol{x}\mid g\in G\}$$

对局部变换群，必须考虑群元素的乘积在 $\boldsymbol{x}$ 上的作用：$O_x = \{g_1 \circ g_2 \circ \cdots \circ g_k \circ \boldsymbol{x} \mid k \geqslant 1,\ g_i \in G$，并且 $g_1 \circ g_2 \circ \cdots \circ g_k \circ \boldsymbol{x}$ 有定义$\}$。

事实上，李变换群的轨道实际上是 M 的子流形，这些轨道子流形的维数可能不同，而且不一定是正则的。

定义 5.14　设 G 是作用在 M 上局部变换群，于是：

(1) 若一切群轨道 O 作为 M 的子流形都具有相同维数，则称李群 G 的作用是半正则的。

(2) 若李群作用是半正则的，而且对每个 $\boldsymbol{x} \in M$ 存在 $\boldsymbol{x}$ 的一个任意小邻域 U，使得 G 的每条轨道与 U 的交集是一个弧连通子集，则称 G 的作用是正则的。

由(2)可知，如果 G 正则作用在 M 上，则 G 的每条轨道都是 M 的正则子流形。

(3) 若只存在一条群作用轨道，即流形 M 本身，则称 G 在 M 上的作用是传递的。

显然，任何传递的变换群的作用都是正则的。在实际应用中，大部分变换群的作用都不是传递的。

下面列举几个李变换群的例子。

【例 5.10】　$\boldsymbol{R}^m$ 上的平移群。

设 $\boldsymbol{a} \neq 0$ 是 $\boldsymbol{R}^m$ 中的一个固定向量，取 $G = \boldsymbol{R}$，定义 $\Psi(t,\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x} + t\boldsymbol{a}$，$\boldsymbol{x} \in \boldsymbol{R}^m$，$t \in \boldsymbol{R}$，容易证明$(\boldsymbol{R},\boldsymbol{R},\Psi)$是一个全局群作用，它的轨道是一些平行于 $\boldsymbol{a}$ 的直线，因此作用是正则的且轨道都是一维的。

【例 5.11】　环面上的无理流。

取 $G = \boldsymbol{R}$，M 是二维环面 T^2，ω 是一个固定实数。通过 T^2 上的角坐标(θ,ρ)定义全局群作用 $\Psi(t,(\theta,\rho)) = (\theta + t, \rho + \omega t) \bmod 2\pi$。

容易证明，G 的轨道都是 T^2 的一维子流形，因此群作用是半

正则的。此外，如果 ω 是有理数，则轨道都是闭曲线，群作用是正则的；如果 ω 是无理数，则每条轨道都是 T^2 的稠密子流形。这就提供了一个最简单的例子：群作用是半正则的，但不是正则的。

5.4 流形上的切空间与向量场

局部地，在 $\boldsymbol{a} \in \boldsymbol{R}^n$ 的某邻域 U，考虑由某种约束给出的流形，即

$$M = \{\boldsymbol{x} \in U;\ \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{0}\} \tag{5.10}$$

式中，$\boldsymbol{g}: U \to \boldsymbol{R}^m$ 是可微的，$\boldsymbol{g}(\boldsymbol{a}) = \boldsymbol{0}$，且 $\boldsymbol{g}'(\boldsymbol{a})$ 是满秩的。下面采用流形的局部参数化表示方法。设 $\psi: V \to \boldsymbol{R}^n$ 是可微的（其中 $V \subset \boldsymbol{R}^{n-m}$ 是 $\boldsymbol{0}$ 的邻域），且 $\psi(\boldsymbol{0}) = \boldsymbol{a}$，进一步假设 $\psi'(\boldsymbol{0})$ 具有满秩 $n-m$，如果 V 足够小时，使得 $\psi: V \to \psi(V)$ 是一个具有连续逆映射的双射，那么，流形可局部表示为

$$M = \{\boldsymbol{x} = \psi(\boldsymbol{z}),\ \boldsymbol{z} \in V\} \tag{5.11}$$

变量 $\boldsymbol{z}$ 称为流形的参数或局部坐标。

【例 5.12】 单位圆由式(5.10)的形式给出，就是 $g(x_1, x_2, x_3) = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 - 1 = 0$，而用局部参数化表示就有多种选择，可取 $\boldsymbol{z} = (z_1, z_2)^{\mathrm{T}} := (x_1, x_2)^{\mathrm{T}}$，$\psi(\boldsymbol{z}) = (z_1, z_2, \pm\sqrt{1 - z_1^2 - z_2^2})^{\mathrm{T}}$（当然 $x_3 = 0$ 除外）。另外，除了南极与北极（即 $x_1 = x_2 = 0$，$x_3 = \pm 1$），还可选择球坐标形式，即 $\psi(\alpha, \beta) = (\cos\alpha\sin\beta, \sin\alpha\sin\beta, \cos\beta)^{\mathrm{T}}$。

定义 5.15 设 M 是一个 m 维光滑流形，$\boldsymbol{x} \in M$ 是一个给定点。M 上通过 $\boldsymbol{x}$ 的一切可能曲线的切向量组成的集合叫做 M 在 $\boldsymbol{x}$ 点的切空间，记为 $TM|_{\boldsymbol{x}}$。即对于流形 M，定义它在 $\boldsymbol{x} \in M$ 点的切空间为

$$TM|_{\boldsymbol{x}} = \begin{cases} \boldsymbol{v} \in \boldsymbol{R}^n \mid \text{存在一可微的曲线 } \gamma: (-\varepsilon, \varepsilon) \to \boldsymbol{R}^n \text{ 满足：} \\ \text{对于所有的 } t,\ \gamma(t) \in M, \text{且 } \gamma(0) = \boldsymbol{x},\ \dot{\gamma}(0) = \boldsymbol{v} \end{cases} \tag{5.12}$$

而 M 上每点的切空间的并集为

$$TM = \bigcup_{x \in M} TM \mid_x$$

它叫做 M 的切丛，它是一个 $2m$ 维光滑流形。

例如，$M = \boldsymbol{R}^m$，则 $TM = \boldsymbol{R}^m \times \boldsymbol{R}^m$。

定理 5.6　如果流形 M 是由式(5.10)给出的，其中 $\boldsymbol{g}: U \to \boldsymbol{R}^m$ 是可微的，$\boldsymbol{g}(\boldsymbol{a}) = \boldsymbol{0}$，且 $\boldsymbol{g}'(\boldsymbol{a})$ 具有满秩 m，那么，点 $\boldsymbol{a} \in M$ 处的切空间为

$$TM \mid_{\boldsymbol{a}} = \ker \boldsymbol{g}'(\boldsymbol{a}) = \{\boldsymbol{v} \in \boldsymbol{R}^n \mid \boldsymbol{g}'(\boldsymbol{a})\boldsymbol{v} = \boldsymbol{0}\} \tag{5.13}$$

如果流形 M 是由式(5.11)给出，其中，$\psi: V \to \boldsymbol{R}^n$ 是可微的，$\psi(\boldsymbol{a}) = \boldsymbol{0}$，且 $\psi'(\boldsymbol{0})$ 具有满秩 $n-m$，那么，点 $\boldsymbol{a} \in M$ 处的切空间为

$$TM \mid_{\boldsymbol{a}} = \mathrm{Im}\psi'(\boldsymbol{0}) = \{\psi'(\boldsymbol{0})\boldsymbol{w} \mid \boldsymbol{w} \in \boldsymbol{R}^{n-m}\} \tag{5.14}$$

证明　首先证明第一部分。因为曲线 $\gamma(t)$ 满足 $\gamma(0) = \boldsymbol{a}$，及 $\boldsymbol{g}(\gamma(t)) = \boldsymbol{0}$，通过微分不难得到 $\boldsymbol{g}'(\boldsymbol{a})\dot{\gamma}(0) = \boldsymbol{0}$。因此，$TM \mid_{\boldsymbol{a}} \subset \ker \boldsymbol{g}'(\boldsymbol{a})$。另一方面，考虑函数 $F(t,\boldsymbol{u}) = \boldsymbol{g}(\boldsymbol{a} + t\boldsymbol{v} + \boldsymbol{g}'(\boldsymbol{a})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{u})$。显然，$F(0,\boldsymbol{0}) = \boldsymbol{0}$，而且，$\dfrac{\partial F}{\partial \boldsymbol{u}}(0,\boldsymbol{0}) = \boldsymbol{g}'(\boldsymbol{a})\boldsymbol{g}'(\boldsymbol{a})^{\mathrm{T}}$ 可逆，根据隐函数定理可由关系式 $F(t,\boldsymbol{u}) = \boldsymbol{0}$ 局部解出 $\boldsymbol{u} = \boldsymbol{u}(t)$。如果 $\boldsymbol{v} \in \ker \boldsymbol{g}'(\boldsymbol{a})$，就有 $\dot{\boldsymbol{u}}(0) = \boldsymbol{0}$，那么，曲线 $\gamma(t) = \boldsymbol{a} + t\boldsymbol{v} + \boldsymbol{g}'(\boldsymbol{a})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{u}(t)$ 就满足式(5.12)的各项要求，因此，$TM \mid_{\boldsymbol{a}} \supset \ker \boldsymbol{g}'(\boldsymbol{a})$。

下面证明第二部分。设流形 M 是由式(5.11)给出的，那么，对于任意 $\eta: (-\varepsilon,\varepsilon) \to \boldsymbol{R}^m$ 满足 $\eta(0) = \boldsymbol{0}$，曲线 $\gamma(t) = \psi(\eta(t))$ 必然落在流形 M 上并满足 $\dot{\gamma}(0) = \psi'(\boldsymbol{0})\dot{\eta}(0)$，可见 $\mathrm{Im}\psi'(\boldsymbol{0}) \subset TM \mid_{\boldsymbol{a}}$。

关于 $\psi'(\boldsymbol{0})$ 的秩的假设意味着，如果把它的分量重新排序，可得 $\psi(\boldsymbol{z}) = (\psi_1(\boldsymbol{z}),\ \psi_2(\boldsymbol{z}))^{\mathrm{T}}$，其中，$\psi_1(\boldsymbol{z})$ 是一个局部微分同胚。如果能证明对于流形 M 上的任意光滑曲线 $\gamma(t)$ 都可以表示为 $\gamma(t) = \psi(\eta(t))$，那么 $\mathrm{Im}\psi'(\boldsymbol{0}) \supset TM \mid_{\boldsymbol{a}}$。为此，根据 ψ 的分解，把曲线分裂为 $\gamma(t) = (\gamma_1(t),\ \gamma_2(t))^{\mathrm{T}}$，并定义 $\eta(t) = \psi_1^{-1}(\gamma_1(t))$。因为对于 $\gamma(t) \in M$，它的第二部分坐标可以由 $\gamma_1(t)$ 惟一确定，因此，

$\gamma(t)=\psi(\eta(t))$。

上述定理的证明进一步说明了关于流形的表述即式(5.10)与式(5.11)是等价的。设流形 M 由式(5.10)给出，并设 $\boldsymbol{Q}$ 的列构成 $TM|_a$ 的一个正交基，那么定理5.6证明中的条件 $\boldsymbol{g}(\boldsymbol{a}+t\boldsymbol{v}+\boldsymbol{g}'(\boldsymbol{a})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{u})=\boldsymbol{0}$ 在 $\boldsymbol{z}=\boldsymbol{0}$ 局部定义了一个函数 $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{z})$，且满足 $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{0})=\boldsymbol{0}$ 及 $\boldsymbol{u}'(\boldsymbol{0})=\boldsymbol{0}$，因此，流形 M 可由式(5.11)给出，其中 $\psi(\boldsymbol{z})=\boldsymbol{a}+\boldsymbol{Q}\boldsymbol{z}+\boldsymbol{g}'(\boldsymbol{a})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{u}(\boldsymbol{z})$。另一方面，设流形 M 是由式(5.11)给出，上述定理证明的第二部分说明，$\boldsymbol{x}=\psi(\boldsymbol{z})$ 可以分解成两部分，即 $\boldsymbol{x}_1=\psi_1(\boldsymbol{z})$ 和 $\boldsymbol{x}_2=\psi_2(\boldsymbol{z})$，其中 ψ_1 是一局部微分同胚。最后，流形 M 可由式(5.10)给出，其中 $\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{x}_2-\psi_2(\psi_1^{-1}(\boldsymbol{x}_1))$。

下面讨论流形上的向量场概念。设 $C=\{\boldsymbol{\varphi}(t)\mid\boldsymbol{\varphi}:I\rightarrow M,t\in I\}$ 是流形 M 上的一条光滑曲线，其中 I 是 $\boldsymbol{R}$ 中的开区间。在局部坐标 $\boldsymbol{x}=(x^1,\cdots,x^m)$ 下，C 由实变量 t 的 m 个光滑函数 $\boldsymbol{\varphi}(t)=(\varphi^1(t),\cdots,\varphi^m(t))$ 确定。在 C 的每点 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{\varphi}(t)$ 处，曲线 C 的切向量就是导数，即

$$\dot{\boldsymbol{\varphi}}(t)=\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{\varphi}}{\mathrm{d}t}=(\dot{\varphi}^1(t),\cdots,\dot{\varphi}^m(t))$$

为了区别切向量和点的局部坐标表示，记切向量为

$$\boldsymbol{V}|_x=\dot{\varphi}^1(t)\frac{\partial}{\partial x^1}+\cdots+\dot{\varphi}^m(t)\frac{\partial}{\partial x^m}\tag{5.15}$$

如果 $\boldsymbol{y}=\boldsymbol{\Psi}(\boldsymbol{x})$ 是任何一个微分同胚，那么

$$\boldsymbol{y}=\boldsymbol{\Psi}(\boldsymbol{\varphi}(t))\tag{5.16}$$

就是曲线 C 在 $\boldsymbol{y}$ 坐标下的局部表示。在新坐标下，切向量式(5.15)的形式为

$$\boldsymbol{V}|_{y=\Psi(x)}=\sum_{j=1}^{m}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\Psi^j(\boldsymbol{\varphi}(t))\frac{\partial}{\partial y^j}=$$

$$\sum_{j=1}^{m}\sum_{k=1}^{m}\frac{\partial\Psi^j}{\partial x^k}(\boldsymbol{\varphi}(t))\frac{\mathrm{d}\varphi^k}{\mathrm{d}t}\frac{\partial}{\partial y^j}\tag{5.17}$$

式(5.17) 可以看做是切向量式(5.15) 在坐标变换式(5.16) 下的变换结果。

定义 5.16　若对 M 上的每点 $\boldsymbol{x}\in M$ 指定一个切向量 $\boldsymbol{V}|_x\in TM|_x$，使得这些切向量随 $\boldsymbol{x}$ 光滑变化，则称 $\boldsymbol{V}=\{\boldsymbol{V}|_x,\ \boldsymbol{x}\in M\}$ 是 M 上的一个向量场。而向量场 $\boldsymbol{V}$ 的积分曲线就是 M 上的一条光滑参数化曲线 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{\varphi}(t)$，在曲线上每点处的切向量与向量场 $\boldsymbol{V}$ 在同一点的值相同，即对一切 $t\in I\subset\boldsymbol{R}$，有

$$\dot{\boldsymbol{\varphi}}(t)=V|_{\boldsymbol{\varphi}(t)}$$

在局部坐标$(x^1,\cdots,x^m)$ 下，M 上的向量场 $\boldsymbol{V}$ 的形式为

$$\boldsymbol{V}|_x=\xi^1(\boldsymbol{x})\frac{\partial}{\partial x^1}+\cdots+\xi^m(\boldsymbol{x})\frac{\partial}{\partial x^m}$$

式中，$\xi^i(\boldsymbol{x})$ 是 $\boldsymbol{x}$ 的光滑函数。而积分曲线 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{\varphi}(t)=(\varphi^1(t),\cdots,\varphi^m(t))$ 必然是如下自治常微分方程组的解：

$$\frac{\mathrm{d}x^i}{\mathrm{d}t}=\xi^i(\boldsymbol{x}),\quad i=1,\cdots,m \tag{5.18}$$

与标准常微分方程理论一样，把式(5.18) 的通过某点 $\boldsymbol{x}_0$ 的存在区间最大的那条积分曲线叫做过 $\boldsymbol{x}_0$ 的最大积分曲线，记为 $\Psi(t,\boldsymbol{x}_0)$。在动力系统理论中，通常把 $\Psi(t,\boldsymbol{x})$ 叫做向量场 $\boldsymbol{V}$ 生成的流(flow)，它具有下面的基本性质：

$$\Psi(t,\Psi(s,\boldsymbol{x}))=\Psi(t+s,\boldsymbol{x}),\quad \boldsymbol{x}\in M \tag{5.19}$$

$$\Psi(0,\boldsymbol{x})=\boldsymbol{x},\quad \boldsymbol{x}\in M \tag{5.20}$$

与

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\Psi(t,\boldsymbol{x})=\boldsymbol{V}|_{\Psi(t,x)} \tag{5.21}$$

式中，t,s 是 $\boldsymbol{R}$ 中使上面等式两端有定义的一切值。

把式(5.19)，式(5.20) 和式(5.4)，式(5.5) 比较，可以看出，向量场 $\boldsymbol{V}$ 生成的流与李群在 M 上的局部群作用是一样的，因此，常常把 $\Psi(t,\boldsymbol{x})$ 叫做单参数(即 t) 变换群。而向量场 $\boldsymbol{V}$ 叫做这种变换群作用的无穷小生成元，因为由 Taylor 定理知，在局部坐标下

$$\Psi(t,\boldsymbol{x})=\boldsymbol{x}+t\xi(\boldsymbol{x})+O(t^2)$$

式中，$\xi(\boldsymbol{x}) = (\xi^1(\boldsymbol{x}), \cdots, \xi^m(\boldsymbol{x}))$ 是 $\boldsymbol{V}$ 的分量。

单参数群作用的轨道就是 $\boldsymbol{V}$ 的最大积分曲线。反之，如果 $\boldsymbol{\Psi}(t,\boldsymbol{x})$ 是作用在 M 上的任何一个单参数变换群，那么它的无穷小生成元就由下式决定：

$$\boldsymbol{V}\mid_x = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\bigg|_{t=0}\boldsymbol{\Psi}(t,\boldsymbol{x}) \tag{5.22}$$

根据常微分方程理论中的关于初值问题的存在惟一性定理可知，局部单参数变换群与它的无穷小生成元之间是一一对应的。

求一个给定向量场 $\boldsymbol{V}$ 生成的流或单参数变换群（即求解常微分方程组）通常叫做对向量场 $\boldsymbol{V}$ 取指数。因此把向量场 $\boldsymbol{V}$ 生成的流记为

$$\exp(t\boldsymbol{V})\boldsymbol{x} \equiv \boldsymbol{\Psi}(t,\boldsymbol{x}) \tag{5.23}$$

利用这种指数记法，前述的三条性质式(5.19)，式(5.20) 和式(5.21) 可以重新写为

$$\exp[(t+s)\boldsymbol{V}]\boldsymbol{x} = \exp(t\boldsymbol{V})\exp(s\boldsymbol{V})\boldsymbol{x} \tag{5.24}$$

$$\exp(0\boldsymbol{V})\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x} \tag{5.25}$$

和

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}[\exp(t\boldsymbol{V})\boldsymbol{x}] = V\mid_{\exp(t\boldsymbol{V})\boldsymbol{x}} \tag{5.26}$$

特别地，$\boldsymbol{V}\mid_x$ 由式(5.26) 取 $t=0$ 的值即是。上述三个式子正反映了指数函数的性质。

【例 5.13】 流形上的向量场和流。

(1) 取 $M=\boldsymbol{R}$，坐标为 $\boldsymbol{x}$，考虑向量场 $\boldsymbol{V} = \dfrac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}} \equiv \partial_x$，那么它的流全局地为

$$\exp(t\boldsymbol{V})\boldsymbol{x} = \exp(t\partial_x)\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x} + t \tag{5.27}$$

若 $\boldsymbol{V} = \boldsymbol{x}\partial_x$，则有

$$\exp(t\boldsymbol{x}\partial_x)\boldsymbol{x} = \mathrm{e}^t\boldsymbol{x} \tag{5.28}$$

因为它是常微分方程 $\dot{\boldsymbol{x}} \equiv \boldsymbol{x}$ 当 $t=0$ 时初值为 $\boldsymbol{x}$ 的解。

(2) 一般地,$M = \boldsymbol{R}^m$ 时,定常向量场 $\boldsymbol{V} = \sum a^i \frac{\partial}{\partial x^i}$, $\boldsymbol{a} = (a^1, \cdots, a^m)$,取指数后得到沿 $\boldsymbol{a}$ 方向的解平移变换群,即

$$\exp(t\boldsymbol{x}\partial_x)\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x} + t\boldsymbol{a}, \quad \boldsymbol{x} \in \boldsymbol{R}^m \tag{5.29}$$

类似地,线性向量场为

$$\boldsymbol{V}_A = \sum_{i=1}^{n} \left(\sum_{j=1}^{m} a_{ij} x^j \right) \frac{\partial}{\partial x^i}$$

其具有流

$$\exp(t\boldsymbol{V}_A)x = \mathrm{e}^{tA}\boldsymbol{x} \tag{5.30}$$

式中,$\boldsymbol{A} = (a_{ij})$ 是 $m \times m$ 常矩阵,并且 $\mathrm{e}^{tA} = \boldsymbol{I} + t\boldsymbol{A} + \frac{1}{2}t^2\boldsymbol{A}^2 + \cdots$ 是通常的指数矩阵。

(3) 考虑平面上的旋转变换群,即

$$\Psi(t,(x,y)) = (x\cos t - y\sin t,\ x\sin t + y\cos t) \tag{5.31}$$

根据定义,它的无穷小生成元就是向量场

$$\boldsymbol{V} = \xi(x,y)\partial_x + \eta(x,y)\partial_y \tag{5.32}$$

式中

$$\xi(x,y) = \left.\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\right|_{t=0} (x\cos t - y\sin t) = -y$$

$$\eta(x,y) = \left.\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\right|_{t=0} (x\sin t + y\cos t) = x$$

实际上,群变换式(5.31)是常微分方程组

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = -y, \quad \frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}t} = x \tag{5.33}$$

的解。

如果 $\boldsymbol{V} = \sum_{i=1}^{m} \xi^i(\boldsymbol{x}) \frac{\partial}{\partial x^i}$ 是 M 上的向量场 $\boldsymbol{V}$ 在 $\boldsymbol{x}$ 坐标下的表达式,$\boldsymbol{y} = \Psi(\boldsymbol{x})$ 是一个坐标变换,则根据式(5.17),在 $\boldsymbol{y}$ 坐标下,$\boldsymbol{V}$ 有表达式

$$V = \sum_{j=1}^{m} \sum_{i=1}^{m} \xi^i(\Psi^{-1}(\boldsymbol{y})) \frac{\partial \Psi^j}{\partial x^i}(\Psi^{-1}(\boldsymbol{y})) \frac{\partial}{\partial y^i} \tag{5.34}$$

下面的命题说明在适当选择的局部坐标下，可以化简流形上的向量场。

命题 5.2 若 V 是 M 上一个在 $\boldsymbol{x}_0 \in M$ 处不为零的向量场：$V|_{\boldsymbol{x}_0} \neq \boldsymbol{0}$，那么存在 $\boldsymbol{x}_0$ 处的局部坐标卡 $\boldsymbol{y} = (y^1, \cdots, y^m)$ 使得在 $\boldsymbol{y}$ 坐标下，$V = \dfrac{\partial}{\partial y^1}$。

命题 5.2 表明，每个不等于零的向量场都局部地等价于平移群的无穷小生成元。在微分方程理论中，命题 5.2 通常叫做直化(straightened out) 定理。

下面考察流形上的函数沿着向量场的流是如何变化的。换言之，设 V 是流形 M 上的向量场，$f: M \to \boldsymbol{R}$ 是光滑函数，现考察当 t 变化时，$f(\exp(tV)\boldsymbol{x})$ 如何变化。在局部坐标下，若 $V = \sum_{i=1}^{m} \xi^i(\boldsymbol{x}) \dfrac{\partial}{\partial x^i}$，则

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} f(\exp(tV)\boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{m} \xi^i(\exp(tV)\boldsymbol{x}) \frac{\partial f}{\partial x^i}(\exp(tV)\boldsymbol{x}) \equiv V(f)[\exp(tV)\boldsymbol{x}] \tag{5.35}$$

特别地，当 $t = 0$ 时，有

$$\left.\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\right|_{t=0} f(\exp(tV)\boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{m} \xi^i(\boldsymbol{x}) \frac{\partial f}{\partial x^i}(\boldsymbol{x}) = V(f)(\boldsymbol{x}) \tag{5.36}$$

因此向量场 V 是作用在 f 上的一阶偏微分算子。根据 Taylor 定理有

$$f(\exp(tV)\boldsymbol{x}) = f(\boldsymbol{x}) + tV(f)(\boldsymbol{x}) + O(t^2) \tag{5.37}$$

故 $V(f)$ 是 f 在 V 的流下的无穷小改变。

若对式(5.35) 继续求导，并代到 Taylor 展开式中，则有

$$f(\exp(t\boldsymbol{V})\boldsymbol{x}) = f(\boldsymbol{x}) + t\boldsymbol{V}(f)(\boldsymbol{x}) + \cdots + \frac{t^k}{k!}\boldsymbol{V}^k(f)(\boldsymbol{x}) + O(t^{k+1}) \quad (5.38)$$

式中，$\boldsymbol{V}^2(f) = \boldsymbol{V}(\boldsymbol{V}(f))$ 等。如果式(5.38)关于 t 收敛，就是李级数，即

$$f(\exp(t\boldsymbol{V})\boldsymbol{x}) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{t^k}{k!}\boldsymbol{V}^k(f)(\boldsymbol{x}) \quad (5.39)$$

这就是流在 f 上作用的结果。

从上面的讨论知道，$\boldsymbol{V}|_x$ 实际上定义了一个实值光滑函数空间上的导数，$\boldsymbol{V}(f)(\boldsymbol{x})$ 是一个数，而且由 $\boldsymbol{V}$ 确定的这种运算满足基本的导数性质：

(1) 线性性质：$\boldsymbol{V}(f+g) = \boldsymbol{V}(f) + \boldsymbol{V}(g)$；　(5.40)

(2) Leibniz 法则：$\boldsymbol{V}(f \circ g) = \boldsymbol{V}(f)g + f\boldsymbol{V}(g)$。　(5.41)

下面讨论流形之间的光滑映射的微分算子。

设 $F:M \to N$ 是光滑流形 M 和 N 之间的光滑映射，M 上的曲线 $C = \{\boldsymbol{\varphi}(t) \mid t \in I\}$，被 F 映射成 N 上的曲线 $\widetilde{C} = F(C) = \{\widetilde{\boldsymbol{\varphi}}(t) = F(\boldsymbol{\varphi}(t)) \mid t \in I\}$，那么 F 诱导出这样一个映射，它把 C 在 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{\varphi}(t)$ 处的切向量 $\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{\varphi}}{\mathrm{d}t}$ 映到 $\widetilde{C}$ 在 $F(\boldsymbol{x}) = F(\boldsymbol{\varphi}(t)) = \widetilde{\boldsymbol{\varphi}}(t)$ 处的切向量 $\frac{\mathrm{d}\widetilde{\boldsymbol{\varphi}}}{\mathrm{d}t}$。这个导出映射就称为 F 的微分，记为

$$\mathrm{d}F(\dot{\boldsymbol{\varphi}}(t)) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\{F(\boldsymbol{\varphi}(t))\} \quad (5.42)$$

一般说来，$F:M \to N$ 的微分就是切空间之间的线性映射，即

$$\mathrm{d}F: TM|_x \to TN|_{F(x)}$$

若 $\boldsymbol{V}|_x \in TM|_x$ 在局部坐标下为

$$\boldsymbol{V}|_x = \sum_{i=1}^{m} \xi^i(\boldsymbol{x}) \frac{\partial}{\partial x^i}$$

则有

$$\mathrm{d}F(\boldsymbol{V}|_x) = \sum_{j=1}^{m}\left(\sum_{i=1}^{m}\xi^i \frac{\partial F^j}{\partial x^i}(\boldsymbol{x})\right)\frac{\partial}{\partial y^j} = \sum_{j=1}^{n}\boldsymbol{V}(F^j(\boldsymbol{x}))\frac{\partial}{\partial y^j} \tag{5.43}$$

而且

$$\mathrm{d}F(\boldsymbol{V}|_x)f(\boldsymbol{y}) = \boldsymbol{V}(f\circ F)(\boldsymbol{x}),\ \boldsymbol{y} = F(\boldsymbol{x}) \tag{5.44}$$

对一切 $\boldsymbol{V}|_x \in TM|_x$ 和一切光滑函数 $f:N\rightarrow \boldsymbol{R}$ 成立。

此外,还有如下命题:

命题 5.3 如果 $F:M\rightarrow N$ 和 $H:N\rightarrow P$ 是流形间的两个光滑映射,那么

$$\mathrm{d}(H\circ F) = \mathrm{d}H\circ \mathrm{d}F \tag{5.45}$$

式中

$$\mathrm{d}F:TM|_x \rightarrow TN|_{y=F(x)}$$
$$\mathrm{d}H:TN|_y \rightarrow TP|_{z=H(y)}$$

而

$$\mathrm{d}(H\circ F):TM|_x \rightarrow TP|_{z=H(F(x))}$$

如果 $F:M\rightarrow N$ 是到 N 上的微分同胚,$\boldsymbol{V}$ 是 M 上的向量场,那么 $\mathrm{d}F(\boldsymbol{V})$ 是 N 上的向量场,而且 $\boldsymbol{V}$ 和 $\mathrm{d}F(\boldsymbol{V})$ 的积分曲线有如下关系:

$$F(\exp(t\boldsymbol{V})\boldsymbol{x}) = \exp(t\mathrm{d}F(\boldsymbol{V}))F(\boldsymbol{x})$$

下面引入向量场的李括号或交换子(commutator)的概念,它在本书中起着重要的作用。

定义 5.17 如果 $\boldsymbol{V},\boldsymbol{W}$ 是流形 M 上的两个向量场,那么它们的李括号$[\boldsymbol{V},\boldsymbol{W}]$ 就是 M 上的满足下式的惟一向量场:

$$[\boldsymbol{V},\boldsymbol{W}](f) = \boldsymbol{V}(\boldsymbol{W}(f)) - \boldsymbol{W}(\boldsymbol{V}(f)),\ f\in C^\infty(M,R)$$

若在局部坐标下,$\boldsymbol{V},\boldsymbol{W}$ 有

$$\boldsymbol{V} = \sum_{i=1}^{m}\xi^i(\boldsymbol{x})\frac{\partial}{\partial x^i},\quad \boldsymbol{W} = \sum_{i=1}^{m}\eta^i(\boldsymbol{x})\frac{\partial}{\partial x^i} \tag{5.46}$$

则
$$[\boldsymbol{V},\boldsymbol{W}]=\sum_{i=1}^{m}\{\boldsymbol{V}(\eta^i)-\boldsymbol{W}(\xi^i)\}\frac{\partial}{\partial x^i}=$$
$$\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m}\left\{\xi^j\frac{\partial\eta^i}{\partial x^j}-\eta^j\frac{\partial\xi^i}{\partial x^j}\right\}\frac{\partial}{\partial x^i}\tag{5.47}$$

命题 5.4　李括号有下列性质：

(1) 双线性：
$$[c\boldsymbol{V}+c'\boldsymbol{V}',\ \boldsymbol{W}]=c[\boldsymbol{V},\boldsymbol{W}]+c'[\boldsymbol{V}',\boldsymbol{W}]$$
及
$$[\boldsymbol{V},\ c\boldsymbol{W}+c'\boldsymbol{W}']=c[\boldsymbol{V},\boldsymbol{W}]+c'[\boldsymbol{V},\ \boldsymbol{W}']\tag{5.48}$$
式中，c，c' 为常数；

(2) 反对称性：
$$[\boldsymbol{V},\boldsymbol{W}]=-[\boldsymbol{W},\boldsymbol{V}]\tag{5.49}$$

(3) Jacobi 恒等式：
$$[\boldsymbol{U},[\boldsymbol{V},\boldsymbol{W}]]+[\boldsymbol{W},[\boldsymbol{U},\boldsymbol{V}]]+[\boldsymbol{V},[\boldsymbol{W},\boldsymbol{U}]]=\boldsymbol{0}\tag{5.50}$$

命题 5.5　如果 $F:M\to N$ 是任意一光滑映射，$\boldsymbol{V}$,$\boldsymbol{W}$ 是 M 上的两个向量场，使得 $\mathrm{d}F(\boldsymbol{V})$ 和 $\mathrm{d}F(\boldsymbol{W})$ 是 N 上有定义的向量场，则等式
$$\mathrm{d}F([\boldsymbol{V},\boldsymbol{W}])=[\mathrm{d}F(\boldsymbol{V}),\ \mathrm{d}F(\boldsymbol{W})]\tag{5.51}$$
成立。

定理 5.7　设 $\boldsymbol{V}$,$\boldsymbol{W}$ 是 M 上的向量场，则对每个 $\boldsymbol{x}\in M$，交换子
$$\psi(t,\boldsymbol{x})=\exp(-\sqrt{t}\boldsymbol{W})\exp(-\sqrt{t}\boldsymbol{V})\exp(\sqrt{t}\boldsymbol{W})\exp(\sqrt{t}\boldsymbol{V})\boldsymbol{x}$$
对充分小的 $t\geqslant 0$ 定义了 M 上的一条光滑曲线，并且李括号 $[\boldsymbol{V},\boldsymbol{W}]|_x$ 就是这条曲线在端点 $\boldsymbol{x}=\psi(0,\boldsymbol{x})$ 的切向量，即
$$[\boldsymbol{V},\boldsymbol{W}]|_x=\left.\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\right|_{t=0^+}\psi(t,\boldsymbol{x})\tag{5.52}$$

下面的定理阐明了两个向量场可交换的充分必要条件是它们的李括号处处为零。

定理 5.8　设 $\boldsymbol{V}$,$\boldsymbol{W}$ 是 M 上的向量场，则
$$\exp(t\boldsymbol{V})\exp(s\boldsymbol{W})\boldsymbol{x}=\exp(s\boldsymbol{W})\exp(t\boldsymbol{V})\boldsymbol{x}\tag{5.53}$$

对一切使两端有定义的 $t,s \in \boldsymbol{R}$，$\boldsymbol{x} \in M$ 成立的充要条件是 $[\boldsymbol{V},\boldsymbol{W}] = \boldsymbol{0}$ 处处成立。

最后，再介绍子流形上的切空间和向量场以及重要的 Frobenius 定理，该定理指出了 m 维流形 M 上的向量场的积分子流形的存在性条件。

若 $N \subset M$ 是子流形，其参数化浸入映射为 $\varphi:\widetilde{N} \to N$，即 $\varphi(\widetilde{N}) = N$，$\widetilde{N}$ 为流形，那么 N 在 $\boldsymbol{y} \in N$ 点的切空间就是 $\widetilde{N}$ 在对应点 $\tilde{\boldsymbol{y}}$ 的切空间的像，即

$$TN\mid_{\boldsymbol{y}} = \mathrm{d}\boldsymbol{\varphi}(T\widetilde{N}\mid_{\tilde{\boldsymbol{y}}}), \quad \boldsymbol{y} = \boldsymbol{\varphi}(\tilde{\boldsymbol{y}}) \in N \tag{5.54}$$

须要注意，$TN\mid_{\boldsymbol{y}}$ 是与 N 具有相同维数的 $TM\mid_{\boldsymbol{y}}$ 的子空间。

命题 5.6 设 $F:M \to \boldsymbol{R}^n$，$n \leqslant m$ 在 $N = \{\boldsymbol{x} \mid F(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{0}\}$ 上具有最大秩，从而 $N \subset M$ 是一个隐式定义的正则的 $m-n$ 维子流形。那么对任何一个 $\boldsymbol{y} \in N$，N 在 $\boldsymbol{y}$ 处的切空间恰为 F 在 $\boldsymbol{y}$ 处的微分算子的核，即

$$TN\mid_{\boldsymbol{y}} = \{\boldsymbol{V} \in TM\mid_{\boldsymbol{y}} \mid \mathrm{d}F(\boldsymbol{V}) = \boldsymbol{0}\}$$

证明 如果 $\boldsymbol{\varphi}(t)$ 是过 $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{\varphi}(t_0)$ 的曲线 $C \subset N$ 的参数表示，则对一切 $t \in I$，$F(\boldsymbol{\varphi}(t)) = \boldsymbol{0}$。两边对 t 求导，得

$$\boldsymbol{0} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}F(\boldsymbol{\varphi}(t)) = \mathrm{d}F(\dot{\boldsymbol{\varphi}}(t))$$

因此，C 的切向量 $\dot{\boldsymbol{\varphi}}$ 在 $\mathrm{d}F$ 的核中。反之利用 $\mathrm{d}F$ 在 $\boldsymbol{y}$ 点秩为 n 的事实通过维数公式即得结论。

引理 5.1 如果 $\boldsymbol{V}$ 和 $\boldsymbol{W}$ 与子流形 N 相切，则它们的李括号 $[\boldsymbol{V},\boldsymbol{W}]$ 也与 N 相切。

证明 设 $\widetilde{\boldsymbol{V}}$ 和 $\widetilde{\boldsymbol{W}}$ 是 $\boldsymbol{V},\boldsymbol{W}$ 在 $\widetilde{N}$ 上的对应向量场，则有

$$\mathrm{d}\boldsymbol{\varphi}[\widetilde{\boldsymbol{V}},\widetilde{\boldsymbol{W}}] = [\mathrm{d}\boldsymbol{\varphi}(\widetilde{\boldsymbol{V}}),\ \mathrm{d}\boldsymbol{\varphi}(\widetilde{\boldsymbol{W}})] = [\boldsymbol{V},\boldsymbol{W}]$$

这表明对每个 $\boldsymbol{y} \in N$，$[\boldsymbol{V},\boldsymbol{W}]\mid_{\boldsymbol{y}} \in TN\mid_{\boldsymbol{y}} = \mathrm{d}\boldsymbol{\varphi}(T\widetilde{N}\mid_{\tilde{\boldsymbol{y}}})$。

由前面的讨论知道，流形 M 上的向量场 $\boldsymbol{V}$ 通过 M 的每点都确定一条积分曲线，使得 $\boldsymbol{V}$ 与它处处相切。以下将要介绍的 Frobenius

定理涉及向量场簇的积分子流形的存在性，这是更一般的情况。

定义 5.18　设 $\boldsymbol{V}_1,\cdots,\boldsymbol{V}_r$ 都是光滑流形 M 上的向量场。向量场簇 $\{\boldsymbol{V}_1,\cdots,\boldsymbol{V}_r\}$ 的积分子流形是 M 的这样的子流形 N，使得在任一点 $\boldsymbol{y}\in N$，其切空间 $TN|_y$ 由向量 $\{\boldsymbol{V}_1|_y,\cdots,\boldsymbol{V}_r|_y\}$ 所张成。

如果通过 M 的每点都存在 $\{\boldsymbol{V}_1,\cdots,\boldsymbol{V}_r\}$ 的积分流形，则称向量场簇 $\{\boldsymbol{V}_1,\cdots,\boldsymbol{V}_r\}$ 是可积的。

由定义可知，积分子流形的维数等于 $\{\boldsymbol{V}_1|_x,\cdots,\boldsymbol{V}_r|_x\}$ 张成的空间的维数，当 $\boldsymbol{x}$ 在 M 上变化时，积分子流形的维数可能会变化。

定义 5.19　M 上的一个向量场簇 $\{\boldsymbol{V}_1,\cdots,\boldsymbol{V}_r\}$ 叫做是对合(involution)的，若存在光滑实值函数 $c_{ij}^k(\boldsymbol{x})$，$\boldsymbol{x}\in M$，$i,j,k=1,\cdots,r$，使得对一切 $i,j=1,\cdots,r$，下面的等式成立，即

$$[V_i,V_j]=\sum_{k=1}^{r}c_{ij}^k(\boldsymbol{x})V_k$$

定理 5.9　(Frobenius 定理) 若 $\boldsymbol{V}_1,\cdots,\boldsymbol{V}_r$ 是流形 M 上的 r 个光滑向量场，那么向量场簇 $\{\boldsymbol{V}_1,\cdots,\boldsymbol{V}_r\}$ 可积的充分必要条件是它们是对合的。

如果向量场簇由无穷多个向量场生成，那么该定理应做适当的修改。

定义 5.20　设 H 是由若干向量场组成的集合，形成一个向量空间。若 $\boldsymbol{V},\boldsymbol{W}\in H$ 蕴含着 $[\boldsymbol{V},\boldsymbol{W}]\subset H$，则称 H 是对合的。

该定义包含了有限生成情况下的定义 5.19。

记

$$H|_x=\operatorname{span}\{\boldsymbol{V}|_x \mid \boldsymbol{V}\in H\}\subset TM|_x \tag{5.55}$$

则 H 的积分子流形就是子流形 $N\subset M$，使得 $TN|_y=H|_y$ 对一切 $\boldsymbol{y}\in N$ 成立。

定义 5.21　如果对于任意向量场 $\boldsymbol{V}\in H$，沿着 $\boldsymbol{V}$ 生成的流，子空间 $H|_{\exp(t\boldsymbol{V})\boldsymbol{x}}$ 的维数不随 t 改变，则称 H 是秩不变的。

注意，定义中的子空间 $H|_{\exp(t\boldsymbol{V})\boldsymbol{x}}$ 的维数可随 $\boldsymbol{x}$ 改变。

由于从$\boldsymbol{x}$发出的$\boldsymbol{V}$的积分曲线$\exp(t\boldsymbol{V})\boldsymbol{x}$应在某个积分子流形$N$中，所以秩不变性当然是可积的必要条件。对于有限生成的H而言，秩不变是自动成立的。

定理 5.10 若H是M上的向量场空间，则H可积的充分必要条件是H对合且秩不变。

实际上，定理的证明可以通过积分子流形的直接构造来进行。如果$\boldsymbol{x}\in N$，那么可以通过考查从$\boldsymbol{x}$出发的相继的积分曲线来得到积分子流形：

$$N=\{\exp(\boldsymbol{V}_1)\circ\exp(\boldsymbol{V}_2)\circ\cdots\circ\exp(\boldsymbol{V}_k)\boldsymbol{x}: k\geqslant 1;\ \boldsymbol{V}_i\in H\} \tag{5.56}$$

秩的不变性意味着对任一个$\boldsymbol{y}\in N$，$H|_{\boldsymbol{y}}$具有相同的维数。

以下把可积向量场簇的全体最大积分子流形叫做M的一个叶层(foliation)，而每个积分子流形叫做叶层中的叶(leaf)。

【例 5.14】 考虑$\boldsymbol{R}^3$中的向量场，即

$$\boldsymbol{V}=-y\partial_x+x\partial_y$$

$$\boldsymbol{W}=2xz\partial_x+2yz\partial_y+(z^2+1-x^2-y^2)\partial_z$$

易证$[\boldsymbol{V},\boldsymbol{W}]=\boldsymbol{0}$，故由定理式(5.9)知，$\{\boldsymbol{V},\boldsymbol{W}\}$是可积的。取定一点$(x,y,z)$，则$\boldsymbol{V}|_{(x,y,z)}$和$\boldsymbol{W}|_{(x,y,z)}$张成的$T\boldsymbol{R}^3$的子空间当$(x,y,z)$在$z$轴和圆周$\{x^2+y^2=1,\ z=0\}$上时是一维的，而其他时候是二维的。不难验证，一切二维积分子流形都是环面，即

$$\xi(x,y,z)=(x^2+y^2)^{-\frac{1}{2}}(x^2+y^2+z^2+1)=c,\quad c>2$$

实际上，由于

$$\mathrm{d}\xi(\boldsymbol{V})=\boldsymbol{V}(\xi)=\boldsymbol{0},\quad \mathrm{d}\xi(\boldsymbol{W})=\boldsymbol{W}(\xi)=\boldsymbol{0}$$

因此由命题5.6知，只要ξ的梯度不全为零，$\boldsymbol{V}$和$\boldsymbol{W}$均与ξ的每个水平集相切。

定义 5.22 (1) 一个可积向量场簇$\{\boldsymbol{V}_1,\cdots,\boldsymbol{V}_r\}$叫做是半正则的，如果$\{\boldsymbol{V}_1|_{\boldsymbol{x}},\cdots,\boldsymbol{V}_r|_{\boldsymbol{x}}\}$张成的子空间的维数不随$\boldsymbol{x}$改变，此时所有积分子流形的维数均相同。

(2) 如果$\{\boldsymbol{V}_1,\cdots,\boldsymbol{V}_r\}$是半正则的可积向量场簇,而且对每个$\boldsymbol{x}\in\boldsymbol{M}$都存在任意小邻域$\boldsymbol{U}$,使得每个最大积分子流形与$\boldsymbol{U}$的交集是弧连通子集,则称该向量场簇是正则的。

半正则性是一种局部性质,它可用坐标来导出,而正则性则依赖于向量场簇的全局结构,如果没有明显找出积分子流形是很难验证的。

任何一个半正则向量场簇都可以通过限制在M的适当小开子集上而成为正则的。例如,例 5.14 中的向量场簇在开子集$\boldsymbol{R}^3\backslash(\{x=y=0\}\cup\{x^2+y^2=1,z=0\})$上是正则的。

对于半正则向量场簇,Frobenius 定理实际上给出了一种通过适当选择局部坐标来平滑(flattening out)积分子流形的方法,正如命题 5.2 对单个向量场的积分曲线的作用一样。

定理 5.11　设$\{\boldsymbol{V}_1,\cdots,\boldsymbol{V}_r\}$是一个可积向量场簇,使得$TM|_x$的子空间$\mathrm{span}\{\boldsymbol{V}_1|_x,\cdots,\boldsymbol{V}_r|_x\}$的维数是与$\boldsymbol{x}\in M$无关的常数$s$,那么对每个$\boldsymbol{x}_0\in M$,存在$\boldsymbol{x}_0$附近的平坦局部坐标$\boldsymbol{y}=(y^1,\cdots,y^m)$,使得积分子流形与这个坐标卡的交集是一些片(slices)$\{\boldsymbol{y}\mid y^1=c_1,\cdots,y^{m-s}=c_{m-s}\}$,其中,$c_1,\cdots,c_{m-s}$是任意常数。此外,若向量场簇还是正则的,那么可以选择上述坐标卡使得每个积分子流形至多与它相交于一片。

对于例 5.14 中的向量场簇,在$z_0\neq0$且不在z轴上的任一点(x_0,y_0,z_0)附近,平坦局部坐标由$\tilde{x}=x$, $\tilde{y}=y$, $\tilde{z}=\xi(x,y,z)$给出,环面$\{\tilde{z}=\text{常数}\}$的切空间由下面的向量场所张成:

$$\frac{\partial}{\partial\tilde{x}}=\frac{\partial}{\partial x}-\frac{x(x^2+y^2-z^2-1)}{2z(x^2+y^2)}\frac{\partial}{\partial z}$$

$$\frac{\partial}{\partial\tilde{y}}=\frac{\partial}{\partial y}-\frac{y(x^2+y^2-z^2-1)}{2z(x^2+y^2)}\frac{\partial}{\partial z}$$

注意,$\left\{\dfrac{\partial}{\partial\tilde{x}},\dfrac{\partial}{\partial\tilde{y}}\right\}$和$\{\boldsymbol{V},\boldsymbol{W}\}$都张出$T\boldsymbol{R}^3$在$(x,y,z)$处的同一个子空间,其中,$z(x^2+y^2)\neq0$,因此确实局部地平滑了例 5.14 中的环面。

5.5 流形上的微分方程及其解法

5.5.1 流形上的微分方程

下面讨论 $\boldsymbol{R}^n$ 中 $n-m$ 维的子流形：

$$M=\{\boldsymbol{x}:\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{0}\} \tag{5.57}$$

$(\boldsymbol{g}:\boldsymbol{R}^n\to\boldsymbol{R}^m)$ 上的微分方程为

$$\dot{\boldsymbol{x}}=\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}),\quad \boldsymbol{x}(t_0)=\boldsymbol{x}_0 \tag{5.58}$$

它具有性质：$\boldsymbol{x}_0\in M$，且对于所有的 t，恒有 $\boldsymbol{x}(t)\in M$。也就是说，$\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x})$ 是通常意义下的微分方程的一个不变量。需要说明的是，这里是一弱不变量，即对于所有 $\boldsymbol{x}\in M$，满足 $\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{0}$，或者等价地表示为 $\boldsymbol{g}'(\boldsymbol{x})\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{0}$。而对于所有 $\boldsymbol{x}\in\boldsymbol{R}^n$，满足 $\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{0}(\boldsymbol{g}'(\boldsymbol{x})\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{0})$ 时，称其为强不变量。

定理 5.12 设 M 是 $\boldsymbol{R}^n$ 中的子流形，问题 $\dot{\boldsymbol{x}}=\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})$ 是流形 M 上的微分方程的充要条件是：对于所有的 $\boldsymbol{x}\in M$，有

$$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})\in T_xM \tag{5.59}$$

证明 根据切空间 T_xM 的定义，必要性是显然的。因为流形上微分方程的精确解一定在流形上，并且有 $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})\in T_xM$ 作为其导数。

要证明其充分性，假设式(5.59)及流形 M 在 $\boldsymbol{x}_0$ 的某邻域可以同式(5.11)一样局部参数化表示为 $\boldsymbol{x}=\psi(\boldsymbol{z})$。我们设法把 $\dot{\boldsymbol{x}}=\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})$，$\boldsymbol{x}(t_0)=\boldsymbol{x}_0=\psi(\boldsymbol{z}_0)$ 的解表示为 $\boldsymbol{x}(t)=\psi(\boldsymbol{z}(t))$，那么，$\boldsymbol{z}(t)$ 满足

$$\psi'(\boldsymbol{z})\dot{\boldsymbol{z}}=\boldsymbol{f}(\psi(\boldsymbol{z})) \tag{5.60}$$

根据式(5.59)的假设，不难导出

$$\dot{\boldsymbol{z}}=\psi'(\boldsymbol{z})^{+}\boldsymbol{f}(\psi(\boldsymbol{z})) \tag{5.61}$$

式中，$\boldsymbol{A}^{+}=(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$ 表示列满秩矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的广义逆矩阵。令

$\boldsymbol{z}(0)=\boldsymbol{0}$，根据常微分方程存在性惟一性定理，式(5.61)的解是存在的。因此，$\boldsymbol{x}(t)=\boldsymbol{\Psi}(\boldsymbol{z}(t))$ 就是微分方程 $\dot{\boldsymbol{x}}=\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})$，$\boldsymbol{x}(t_0)=\boldsymbol{x}_0$ 的解。即解 $\boldsymbol{x}(t)\in M$。

5.5.2 投影方法

求解流形上的微分方程的一个非常有效的办法是采用投影技术[5]。假设已经获得 $\boldsymbol{x}_n\in M$，欲求得 $\boldsymbol{x}_{n+1}\in M$，标准的投影方法需要的两个步骤就是：用任意的 p 阶一步方法 $\boldsymbol{\Phi}_h$ 来求解通常意义下的微分方程 $\dot{\boldsymbol{x}}=\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})$，得到 $\tilde{\boldsymbol{x}}_{n+1}=\boldsymbol{\Phi}_h(\boldsymbol{x}_n)$；而后把 $\tilde{\boldsymbol{x}}_{n+1}$ 投影到流形 M 上获得 $\boldsymbol{x}_{n+1}$。因为 $\boldsymbol{x}_n\in M$，所以 $\tilde{\boldsymbol{x}}_{n+1}$ 到流形 M 的距离同局部误差 $O(h^{p+1})$。因此所作的投影处理不会破坏方法的收敛性。

要计算 $\boldsymbol{x}_{n+1}$，必须考虑约束最小化问题，即

$$\|\boldsymbol{x}_{n+1}-\tilde{\boldsymbol{x}}_{n+1}\|\rightarrow\min \tag{5.62}$$

并满足

$$\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}_{n+1})=\boldsymbol{0} \tag{5.63}$$

为此，通常都引入 Lagrange 乘子 $\boldsymbol{\lambda}=(\lambda_1,\cdots,\lambda_m)^{\mathrm{T}}$，并考虑 Lagrange 函数，即

$$\Gamma(\boldsymbol{x}_{n+1},\boldsymbol{\lambda})=\|\boldsymbol{x}_{n+1}-\tilde{\boldsymbol{x}}_{n+1}\|^2/2-\boldsymbol{g}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x}_{n+1})\boldsymbol{\lambda} \tag{5.64}$$

由必要条件 $\dfrac{\partial\Gamma}{\partial\boldsymbol{x}_{n+1}}=0$，即可导出

$$\boldsymbol{x}_{n+1}=\tilde{\boldsymbol{x}}_{n+1}+(\boldsymbol{g}'(\tilde{\boldsymbol{x}}_{n+1}))^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\lambda} \tag{5.65}$$

$$\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}_{n+1})=\boldsymbol{0} \tag{5.66}$$

为了减少计算量，在式(5.65)中把 $\boldsymbol{g}'(\boldsymbol{x})$ 中的 $\boldsymbol{x}_{n+1}$ 换成了 $\tilde{\boldsymbol{x}}_{n+1}$。把式(5.65)代入式(5.66)就得到一关于 $\boldsymbol{\lambda}$ 的非线性方程，当然可以用简单的 Newton 迭代方法求解，可得

$$\boldsymbol{\lambda}_{i+1}=\boldsymbol{\lambda}_i+\Delta\boldsymbol{\lambda}_i \tag{5.67}$$

式中

$$\Delta\boldsymbol{\lambda}_i=-(\boldsymbol{g}'(\tilde{\boldsymbol{x}}_{n+1})(\boldsymbol{g}'(\tilde{\boldsymbol{x}}_{n+1}))^{\mathrm{T}})^{-1}\boldsymbol{g}(\tilde{\boldsymbol{x}}_{n+1}+(\boldsymbol{g}'(\tilde{\boldsymbol{x}}_{n+1}))^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\lambda}_i) \tag{5.68}$$

通常选取 $\boldsymbol{\lambda}_0=\mathbf{0}$，则其增量 $\Delta\boldsymbol{\lambda}_0$ 为 $O(h^{p+1})$。

5.5.3 流形上基于局部坐标的数值方法

从 5.5.1 节流形上的微分方程的参数化表示可以得到启发，本节讲述在流形的参数空间进行积分来求解流形上的微分方程，并给出流形上基于局部坐标的数值方法。

假设 $\boldsymbol{x}_n\in M$，而 ψ 是 M 的一个局部参数化映射，满足 $\boldsymbol{x}_n=\Psi(\boldsymbol{z}_n)$，那么，可以如下定义一个单步方法：

(1) 用任意数值方法 $\boldsymbol{\Phi}_h$ 求解微分方程式(5.61)，得到 $\tilde{\boldsymbol{z}}_{n+1}=\boldsymbol{\Phi}_h(\boldsymbol{z}_n)$；

(2) 用 $\boldsymbol{x}_{n+1}=\psi(\tilde{\boldsymbol{z}}_{n+1})$ 来求原问题的数值解。

应当指出，参数化映射 $\boldsymbol{x}=\psi(\boldsymbol{z})$ 可以在每一步进行调整或改变，而且，局部坐标有多种选择。

【例 5.15】 考虑单摆方程，即

$$\dot{q}_1=p_1,\quad \dot{p}_1=-q_1\mu$$
$$\dot{q}_1=p_2,\quad \dot{p}_2=-1-q_2\mu$$

式中，$\mu=(p_1^2+p_2^2-q_2)/(q_1^2+q_2^2)$。这里微分方程所在的流形为

$$M=\{(q_1,q_2,p_1,p_2)\mid p_1^2+p_2^2=1,\ q_1p_1+q_2p_2=0\}$$

当然有多种局部坐标可以选择，一个标准的参数化方法为

$$q_1=\sin\alpha,\ q_2=-\cos\alpha,\ p_1=\omega\cos\alpha,\ p_2=\omega\sin\alpha$$

在新坐标系(α,ω)下，原问题简单地变为

$$\dot{\alpha}=\omega,\quad \dot{\omega}=-\sin\alpha$$

通常采用如下的两种参数化方法。

(1) 广义坐标分解方法(generalized coordinate partitioning)。假设微分流形 M 由式(5.57)给出，并设 $\boldsymbol{g}:\boldsymbol{R}^n\to\boldsymbol{R}^m$ 的 Jacobi 矩阵在 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{a}$ 具有满秩 m，那么，可以找到一种分解 $\boldsymbol{x}=(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2)$，满足 $\dfrac{\partial\boldsymbol{g}}{\partial\boldsymbol{x}_2}$ 是可逆的，因此可以选取 $\boldsymbol{x}_1$ 来作局部坐标。那么参数化映射

$\boldsymbol{x} = \psi(\boldsymbol{z})$ 即为：$x_1 = z$，$x_2 = \psi_2(z)$，其中的 $\Psi_2(z)$ 由隐函数 $g(z, \psi_2(z)) = 0$ 惟一确定。

(2) 常用的参数化方法为切空间参数化方法。设微分流形 M 由式(5.57) 给出，由流形上 $\boldsymbol{a}$ 点处的切空间 T_aM 的正交基构成矩阵 $\boldsymbol{Q}$。那么考虑其参数化映射，即

$$\psi_a(\boldsymbol{z}) = \boldsymbol{a} + \boldsymbol{Q}\boldsymbol{z} + \boldsymbol{g}'(\boldsymbol{a})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{u}(\boldsymbol{z}) \tag{5.69}$$

其中，$\boldsymbol{u}(\boldsymbol{z})$ 由 $\boldsymbol{g}(\psi_a(\boldsymbol{z})) = \boldsymbol{0}$ 确定。将式(5.69) 进行微分，可得

$$(\boldsymbol{Q} + \boldsymbol{g}'(\boldsymbol{a})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{u}'(\boldsymbol{z}))\dot{\boldsymbol{z}} = \dot{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{f}(\psi_a(\boldsymbol{z})) \tag{5.70}$$

因为，$\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{I}$，而且，$\boldsymbol{g}'(\boldsymbol{a})\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{0}$，从而式(5.70) 等价于如下微分方程：

$$\dot{\boldsymbol{z}} = \boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{f}(\psi_a(\boldsymbol{z})) \tag{5.71}$$

它对应于式(5.61)。

5.6 李代数

如果G是一个李群，那么在G上就存在某些特别的向量场，它们由群作用下的不变性来刻画。下面将看到，这些不变向量场形成一个有限维向量空间，称为 G 的李代数。精确地说，李代数实际上是 G 的无穷小生成元。实际上，G 里的几乎所有信息都包含在它的李代数中。利用这一基本事实，使我们能够将在群作用下不变的、复杂的非线性条件用相对简单的线性无穷小条件代替。这一方法是非常重要的，在李群对微分方程的应用中，几乎所有领域最终都归结到李代数的构造上。

定义 5.23 设 G 是一个李群，则

(1) 对任意 $g \in G$，定义右乘积变换 $R_g: G \to G$ 为

$$R_g(h) = h \circ g \tag{5.72}$$

R_g 是一个微分同胚，其逆为 $R_{g^{-1}}; = (R_g)^{-1}$；

(2) 设 $\boldsymbol{V}$ 是G 上的向量场，对于一切 $g, h \in G$，如果

$$\mathrm{d}R_g(\boldsymbol{V}|_h) = \boldsymbol{V}|_{R_g(h)} = \boldsymbol{V}|_{h\circ g} \tag{5.73}$$

则称 $\boldsymbol{V}$ 是右不变的。

注意，如果 $\boldsymbol{V},\boldsymbol{W}$ 是右不变的，那么它们的任意线性组合也是右不变的，因此所有右不变向量场形成一个向量空间。

定义 5.24 李群 G 的李代数就是 G 上的一切右不变向量场组成的向量空间，G 的李代数用 g 表示。

命题 5.7 G 上的任一个右不变向量场由它在单位元的值惟一确定。

证明 若 $\boldsymbol{V}$ 是 G 上的右不变向量场，取任意 $\rho\in G$，由于 $R_\rho(e)=\rho$，所以

$$\boldsymbol{V}|_\rho = \mathrm{d}R_\rho(\boldsymbol{V}|_e) \tag{5.74}$$

反之，在 G 的单位元 e 处的任一切向量，通过式(5.74)惟一确定一个 G 上的右不变向量场。实际上

$$\mathrm{d}R_\rho(\boldsymbol{V}|_h) = \mathrm{d}R_\rho(\mathrm{d}R_h(\boldsymbol{V}|_e)) = \mathrm{d}(R_\rho\circ R_h)(\boldsymbol{V}|_e) = \mathrm{d}R_{h\circ\rho}(\boldsymbol{V}|_e) = \boldsymbol{V}|_{h\circ\rho}$$

从而 $\boldsymbol{V}$ 是右不变的。

利用这个命题，可把 G 的李代数 g 和 G 在单位元处的切空间 $TG|_e$ 视为等同的，即

$$g \simeq TG|_e \tag{5.75}$$

由式(5.75)可知，g 是与 G 具有相同维数的有限维向量空间。

上述李群 G 的李代数 g 除也具有向量空间结构外，还具有一种重要的反对称双线性运算性质，即李括号运算。事实上，若 $\boldsymbol{V},\boldsymbol{W}\in g$，则由于

$$\mathrm{d}R_g[\boldsymbol{V},\boldsymbol{W}] = [\mathrm{d}R_g(\boldsymbol{V}),\ \mathrm{d}R_g(\boldsymbol{W})] = [\boldsymbol{V},\boldsymbol{W}]$$

因此 $[\boldsymbol{V},\boldsymbol{W}]\in g$。

以下引入一般的李代数定义。

定义 5.25 李代数就是这样一个向量空间 g，它的元素之间存在一种称为李括号的双线性运算：$[,]:g\times g\rightarrow g$，对于一切 $\boldsymbol{U}$，

$\boldsymbol{V},\boldsymbol{V}',\boldsymbol{W},\boldsymbol{W}' \in g$,满足下面几条性质:

(1) 双线性:

$$[c\boldsymbol{V}+c'\boldsymbol{V}',\boldsymbol{W}] = c[\boldsymbol{V},\boldsymbol{W}]+c'[\boldsymbol{V}',\boldsymbol{W}]$$

及
$$[\boldsymbol{V},c\boldsymbol{W}+c'\boldsymbol{W}'] = c[\boldsymbol{V},\boldsymbol{W}]+c'[\boldsymbol{V},\boldsymbol{W}']$$

其中,$c,c' \in \boldsymbol{R}$ 为常数。

(2) 反对称性:

$$[\boldsymbol{V},\boldsymbol{W}] = -[\boldsymbol{W},\boldsymbol{V}]$$

(3) Jacobi 恒等式:

$$[\boldsymbol{U},[\boldsymbol{V},\boldsymbol{W}]]+[\boldsymbol{W},[\boldsymbol{U},\boldsymbol{V}]]+[\boldsymbol{V},[\boldsymbol{W},\boldsymbol{U}]] = \boldsymbol{0}$$

【例5.16】 如果$G=\boldsymbol{R}$,则除相差常数倍以外,只存在一个右不变向量场,即 $\partial_x = \dfrac{\partial}{\partial x}$。

实际上,任取 $x,y\in\boldsymbol{R}$, $R_y(x) = x+y$,因此 $\mathrm{d}R_y(\partial_x) = \partial_x$。

类似地,如果 $G=\boldsymbol{R}^+$,则惟一的独立右不变向量场是 $x\partial_x$。

对于 $G=SO(2)$,∂_θ 是仅有的独立右不变向量场。

注意,$\boldsymbol{R}$,$\boldsymbol{R}^+$ 和 $SO(2)$ 的李代数都是同一个一维的具有平凡李括号(对于一切 $\boldsymbol{V},\boldsymbol{W}\in g$,$[\boldsymbol{V},\boldsymbol{W}]=\boldsymbol{0}$)的向量空间。根据定义不难验证,只存在一个一维李代数,即 $g=\boldsymbol{R}$,它必然有平凡李括号。

【例 5.17】 计算一般线性群 $GL(n)$ 的李代数。

由于 $GL(n)$ 是 n^2 维的,可以把它的李代数 $gl(n)\simeq\boldsymbol{R}^{n^2}$ 与一切 $n\times n$ 矩阵组成的空间视为同一。实际上,$GL(n)$ 上的坐标可以由矩阵的元素 $x_{ij}\,(i,j=1,\cdots,n)$ 来确定,所以 $GL(n)$ 在单位元处的切空间就是所有如下向量场的集合:

$$\boldsymbol{V}_{\boldsymbol{A}}\,|_{\boldsymbol{I}} = \sum_{i,j=1}^{n} a_{ij}\,\frac{\partial}{\partial x_{ij}}\bigg|_{\boldsymbol{I}}$$

式中,$\boldsymbol{A}=(a_{ij})$ 是任意 $n\times n$ 矩阵。现在给定 $\boldsymbol{Y}=(y_{ij})\in GL(n)$,则矩阵 $\boldsymbol{R}_{\boldsymbol{Y}}(\boldsymbol{X})=\boldsymbol{XY}$ 元素为 $\sum\limits_{k=1}^{n} x_{ik}y_{kj}$。所以,根据式(5.74) 可得

$$\boldsymbol{V}_{\boldsymbol{A}}\mid_{Y}=\mathrm{d}\boldsymbol{R}_{Y}(\boldsymbol{V}_{\boldsymbol{A}}\mid_{I})=$$

$$\sum_{l,m}\sum_{i,j}a_{ij}\frac{\partial}{\partial x_{ij}}\Big(\sum_{k}a_{lk}y_{km}\Big)\frac{\partial}{\partial x_{lm}}=\sum_{i,j,m}a_{ij}y_{jm}\frac{\partial}{\partial x_{im}}$$

对于 $\boldsymbol{X}\in GL(n)$，有

$$\boldsymbol{V}_{\boldsymbol{A}}\mid_{X}=\sum_{i,j}\Big(\sum_{k}a_{ik}x_{kj}\Big)\frac{\partial}{\partial x_{ij}} \tag{5.76}$$

因此

$$[\boldsymbol{V}_{\boldsymbol{A}},\boldsymbol{V}_{\boldsymbol{B}}]=\sum_{\substack{i,j,k\\l,m,p}}^{n}\left\{a_{lp}x_{pm}\frac{\partial}{\partial x_{lm}}(b_{ik}x_{kj})-b_{lp}x_{pm}\frac{\partial}{\partial x_{lm}}(a_{ik}x_{kj})\right\}\frac{\partial}{\partial x_{ij}}=$$

$$\sum_{i,j,k}\Big[\sum_{l}(b_{il}a_{lk}-a_{il}b_{lk})\Big]x_{kj}\frac{\partial}{\partial x_{ij}}=$$

$$\boldsymbol{V}_{[\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}]}$$

式中，$[\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}]\equiv\boldsymbol{BA}-\boldsymbol{AB}$ 是矩阵交换子。所以，$GL(n)$ 的李代数 $gl(n)$ 就是所有 $n\times n$ 矩阵的空间，李括号就是矩阵交换子。

下面的结果说明，在 G 的(连通)单参数子群和 g 的一维子空间之间存在一一对应关系。

命题5.8 若 $\boldsymbol{V}\neq\boldsymbol{0}$ 是李群 G 上的右不变向量场，那么 $\boldsymbol{V}$ 生成的过单位元的流为

$$g_t=\exp(t\boldsymbol{V})e \tag{5.77}$$

对一切 $t\in\boldsymbol{R}$ 有定义，并且形成 G 的满足以下条件的单参数子群，即

$$g_{t+s}=g_t\circ g_s,\ g_0=e,\ g_t^{-1}=g_{-t} \tag{5.78}$$

它同构于 $\boldsymbol{R}$ 或圆周群 $SO(2)$。反之，G 的任何连通一维子群都按上述方式由右不变向量场生成。

【例5.18】 $G=GL(n)$ 和 $g=gl(n)$ 如例5.16定义。如果 $\boldsymbol{A}\in gl(n)$，则对应的右不变向量场 $\boldsymbol{V}_{\boldsymbol{A}}$ 由式(5.76)定义，单参数子群 $\exp(t\boldsymbol{V}_{\boldsymbol{A}})e$ 可以通过求解 n^2 个常微分方程组

$$\frac{\mathrm{d}x_{ij}}{\mathrm{d}t}=\sum_{k=1}^{n}a_{ik}x_{kj},\ x_{ij}(0)=\delta_j^i,\ i,j=1,\cdots,n \tag{5.79}$$

来确定，其解恰为矩阵指数 $\boldsymbol{X}(t)=\mathrm{e}^{t\boldsymbol{A}}$，它是 $GL(n)$ 的由 $gl(n)$ 中的矩阵 $\boldsymbol{A}$ 生成的单参数子群。

【例 5.19】 对于环面 T^2，考虑如下定义的群运算：

$$(\theta,\rho)\circ(\theta',\rho')=(\theta+\theta',\rho+\rho')\bmod 2\pi$$

显然 T^2 的李代数由右不变向量场$\dfrac{\partial}{\partial\theta}$ 和$\dfrac{\partial}{\partial\rho}$ 张成，相应的李括号为平凡括号：$[\partial_\theta,\partial_\rho]=0$。对某个 $\omega\in R$，令 $V_\omega=\partial_\theta+\omega\partial_\rho$。那么相应的单参数子群为

$$\exp(t\boldsymbol{V}_\omega)(0,0)=(t,t\omega)\bmod 2\pi,\quad t\in R$$

这正好是定义 5.9 后面讨论过的子群 H_ω。特别地，当 ω 为有理数时，H_ω 是同构于 $SO(2)$ 的闭的单参数子群，而当 ω 为无理数时，H_ω 是同构于 $\boldsymbol{R}$ 的稠子群。这表明，仅从无穷小生成元的知识一般很难指出相应的单参数子群的准确特征。

定义 5.26 李代数 g 的子代数是一个关于李括号封闭的向量子空间 η，即对任何 $\boldsymbol{V},\boldsymbol{W}\in\eta$ 有$[\boldsymbol{V},\boldsymbol{W}]\in\eta$。

定理 5.13 若 $\boldsymbol{G}$ 为李群，g 为它的李代数。如果 $H\subset G$ 是李子群，那么它的李代数是 g 的子代数。反之，如果 η 是 g 的任一个 s 维子代数，那么存在 G 的惟一的连通 s 参数李子群 H，使 η 是 H 的李代数。

定理 5.13 大大简化了一般线性群 $GL(n)$ 的李子群的李代数的计算。实际上如果 $H\subset GL(n)$ 是子群，那么它的李代数 η 就是一切 $n\times n$ 矩阵构成的李代数 $gl(n)$ 的一个子代数，矩阵交换子为其李括号。此外，只要考察一下 $GL(n)$ 的包含在 H 中的一切单参数子群 $\eta=\{\boldsymbol{A}\in gl(n):\mathrm{e}^{t\boldsymbol{A}}\in H,\ t\in\boldsymbol{R}\}$，就能发现 η 与$TH\mid_e$ 同构。

例如，为求得正交群 $O(n)$ 的李代数，需找出一切使得 $(\mathrm{e}^{t\boldsymbol{A}})(\mathrm{e}^{t\boldsymbol{A}})^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{I}$ 的 $n\times n$ 矩阵。对 t 微分并令 $t=0$，则得 $\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{0}$。所以 $SO(n)=\{\boldsymbol{A}:\boldsymbol{A}$ 是反对称矩阵$\}$，同时是 $O(n)$ 和 $SO(n)$ 的

李代数。其他矩阵李群的李代数可以类似求得。

定理 5.14 设 g 是有限维李代数，则存在惟一一个单连通李群 G^*，以 g 为其李代数。此外，如果 G 是另一个以 g 为其李代数的连通李群，则 $\pi:G^* \to G$ 是 G 的单连通李覆盖群（即 π 是群同态，而 G^* 和 G 是局部同构李群）。

下面引入指数映射的概念。

定义 5.27 设 G 为李群，$\boldsymbol{V}$ 为其上的向量场。在 $\boldsymbol{V}$ 生成的单参数子群中令 $t=1$，得到的映射 $\exp:g \to G$。

$$\exp(\boldsymbol{V}) \equiv \exp(\boldsymbol{V})e \tag{5.80}$$

称为指数映射。

不难证明，指数映射在 0 处的微分是恒同映射，即

$$\mathrm{dexp}: Tg\mid_0 \simeq g \to TG\mid_e \simeq g \tag{5.81}$$

于是，根据反函数定理，exp 确定了一个从 g 到 G 的单位元的邻域的局部微分同胚。因此，每个充分靠近单位元的群元素都可以写成指数形式，即 $g=\exp(\boldsymbol{V})$，$\boldsymbol{V}\in g$ 为某个向量。

利用命题 5.1，总可以把任一群元素 g 写为有限个指数的积，即

$$g=\exp(\boldsymbol{V}_1)\exp(\boldsymbol{V}_2)\cdots\exp(\boldsymbol{V}_k)$$

式中，$\boldsymbol{V}_1,\cdots,\boldsymbol{V}_k\in g$，这一事实的重要推论是：为了证明某个对象在整个李群下的不变性，只须证明在 G 的单参数子群下的不变性。通过 g 中对应的无穷小生成元下的无穷小不变性又可证明后一结论。

下面讨论局部李群。

考虑一个局部李群 $V\subset \boldsymbol{R}^r$，$m(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})$ 为群运算。对应的右平移 $R_y:V\to\boldsymbol{R}^r$ 为 $R_y(\boldsymbol{x})=m(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})$。只要 $\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}$ 和 $m(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})$ 在 V 中，V 上的向量场 $\boldsymbol{V}$ 为右不变的充分必要条件为

$$\mathrm{d}R_y(\boldsymbol{V}\mid_x)=\boldsymbol{V}\mid_{R_y(x)}=\boldsymbol{V}\mid_{m(x,y)} \tag{5.82}$$

与全局李群的情况一样，容易证明右不变向量场都可以由它在原

点(单位元)处的值惟一确定,即

$$\boldsymbol{V}\,|_{x} = \mathrm{d}R_{x}(\boldsymbol{V}\,|_{0}) \tag{5.83}$$

因此,局部李群 V 的李代数作为 V 上的右不变向量场的空间是一个 r 维向量空间。实际上,我们可以从群运算公式直接确定 g。

命题 5.9　设 $V \subset \boldsymbol{R}^r$ 是一个局部李群,其群运算为$m(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})$,$\boldsymbol{x},\boldsymbol{y} \subset V$。那么 V 上的右不变向量场的李代数由下列向量场张成:

$$\boldsymbol{V}_k = \sum_{i=1}^{r} \xi_k^i(\boldsymbol{x}) \frac{\partial}{\partial x^i}, \quad k = 1,\cdots,r \tag{5.84}$$

式中,$\xi_k^i(\boldsymbol{x}) = \dfrac{\partial m^i}{\partial x^k}(\boldsymbol{0},\boldsymbol{x})$。这里 m^i 是 m 的第 i 个分量,$\dfrac{\partial}{\partial x^k}$ 是对 $m(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})$ 中第 r 个变量求导,然后在 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$, $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{x}$ 取值。

证明　由于 $R_y(\boldsymbol{x}) = m(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})$,有

$$\mathrm{d}R_y\left(\sum_{i=1}^{r} \xi_k^i(\boldsymbol{0}) \frac{\partial}{\partial x^i}\right) = \sum_{i,j} \xi_k^i(\boldsymbol{0}) \frac{\partial m^j}{\partial x^i}(\boldsymbol{0},\boldsymbol{y}) \frac{\partial}{\partial x^j}$$

从而只要证明 $\xi_k^i(\boldsymbol{0}) = \delta_k^i$,即

$$\frac{\partial m^i}{\partial x^k}(\boldsymbol{0},\boldsymbol{0}) = \begin{cases} 1, & i = k \\ 0, & i \neq k \end{cases}$$

但这可以由 $m(\boldsymbol{x},\boldsymbol{0}) = \boldsymbol{x}$ 为恒同映射直接推出。

【例 5.20】　考虑局部李群 $V = \{x \mid |x| < 1\} \subset \boldsymbol{R}$,有

$$m(x,y) = \frac{2xy - x - y}{xy - 1}, \quad x,y \in V$$

它的李代数 g 是一维的,由向量场 $\xi(x)\partial_x$ 张成,根据式(5.84),有

$$\xi(x) = \frac{\partial m}{\partial x}(0,x) = (x-1)^2$$

因此,$\boldsymbol{V} = (x-1)^2\partial_x$ 是 V 上惟一的独立右不变向量场。

若 g 是一个有限维李代数,则根据定理 5.14,g 是某个李群 G 的李代数。如果设想$\{\boldsymbol{V}_1,\cdots,\boldsymbol{V}_r\}$是 g 的一组基,那么就存在一组常数 c_{ij}^k, $i,j,k = 1,\cdots,r$,使得

$$[\boldsymbol{V}_i,\boldsymbol{V}_j] = \sum_{k=1}^{r} c_{ij}^{k}\boldsymbol{V}_k,\quad i,j = 1,\cdots,r \tag{5.85}$$

由于李括号还满足反对称性和 Jacobi 恒等式，因此不难验证 c_{ij}^k 还必须满足下面的限制条件：

（1）反对称性：

$$c_{ij}^{k} = - c_{ji}^{k},\quad i,j,k = 1,2,\cdots,r \tag{5.86}$$

（2）Jacobi 恒等式：

$$\sum_{k=1}^{r}(c_{ij}^{k}c_{kl}^{m} + c_{li}^{k}c_{kj}^{m} + c_{jl}^{k}c_{ki}^{m}) = 0,\quad i,j,l,m = 1,2,\cdots,r \tag{5.87}$$

由于 $\boldsymbol{V}_i(i = 1,\cdots,r)$ 构成一组基，如果我们知道 c_{ij}^k，利用式(5.85) 和李括号的双线性即可重新构造出李代数 g 来。因此称满足条件即式(5.86) 和式(5.87) 的常数组 c_{ij}^k 为李代数 g 的结构常数。反之，不难证明，任意一组满足式(5.86) 和式(5.87) 的常数 c_{ij}^k 都是某个李代数的结构常数。

如果选取 g 的另一组基 $\hat{\boldsymbol{V}}_i$ 为

$$\hat{\boldsymbol{V}}_i = \sum_{j=1}^{r} a_{ij}\boldsymbol{V}_j,\quad i = 1,\cdots,r$$

式中，矩阵(a_{ij}) 可逆，则相对于$\{\hat{\boldsymbol{V}}_i\}_1^r$ 的结构常数为

$$\hat{c}_{ij}^{k} = \sum_{l,m,n=1}^{r} a_{il}a_{jm}b_{nk}c_{lm}^{n} \tag{5.88}$$

式中，(b_{ij}) 是(a_{ij}) 的逆矩阵。

因此，两组结构常数确定同一个李代数的充分必要条件是：存在矩阵(a_{ij})，使它们满足式(5.88)。于是由定理 5.14 可见，在连通李群的李代数和满足式(5.86) 和式(5.87) 的结构常数的等价类之间存在一一对应。所以，可以通过研究代数方程式(5.86) 和式(5.87) 来研究有限维李代数的性质，当然这并不能代替整个李群理论。

展示一个李代数的结构，最方便的方法是用交换子表。如果 g 是一个 r 维李代数，$\boldsymbol{V}_1,\cdots,\boldsymbol{V}_r$ 是它们的一组基，那么 g 的交换子表就是一个 $r\times r$ 表格，第 (i,j) 个元素就表示李括号 $[\boldsymbol{V}_i,\boldsymbol{V}_j]$。由于李括号是反对称的，交换子表也是反对称的，特别是对角线上的元素为 0。有了交换子表，结构常数就可以很方便地从交换子表中读出，即 c_{ij}^k 就是交换子表中第 (i,j) 个元素里 $\boldsymbol{V}_k$ 的系数。

以特殊线性群 $SL(2)$ 的李代数 $g = sl(2)$ 为例说明交换子表的表示法。此时 g 由迹为零的 2×2 矩阵全体组成，取一组基为

$$\boldsymbol{A}_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix},\quad \boldsymbol{A}_2 = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} \end{bmatrix},\quad \boldsymbol{A}_3 = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

那么相应的交换子表见表 5.1。

表 5.1　交换子

	$\boldsymbol{A}_1$	$\boldsymbol{A}_2$	$\boldsymbol{A}_3$
$\boldsymbol{A}_1$	0	$\boldsymbol{A}_1$	$-2\boldsymbol{A}_2$
$\boldsymbol{A}_2$	$-\boldsymbol{A}_1$	0	$\boldsymbol{A}_3$
$\boldsymbol{A}_3$	$2\boldsymbol{A}_2$	$-\boldsymbol{A}_3$	0

例如，从表中可知 $[\boldsymbol{A}_1,\boldsymbol{A}_3] = \boldsymbol{A}_3\boldsymbol{A}_1 - \boldsymbol{A}_1\boldsymbol{A}_3 = -2\boldsymbol{A}_2$ 等。结构常数是 $c_{12}^1 = c_{23}^3 = 1 = -c_{21}^1 = -c_{32}^3$，$c_{13}^2 = -2 = -c_{31}^2$，其他 c_{ij}^k 全为零。

下面简要地介绍无穷小群作用。

设 G 是作用在流形 M 上的局部变换群，即

$$g\circ \boldsymbol{x} = \Psi(g,\boldsymbol{x}),\quad (g,\boldsymbol{x})\in U\subset G\times M$$

那么相应地，存在 G 的李代数 g 在 M 上的无穷小作用。换言之，如果 $\boldsymbol{V}\in g$，则定义 $\psi(\boldsymbol{V})$ 是 M 上的这样一个向量场，其确定的流与 G 的单参数子群 $\exp(t\boldsymbol{V})$ 在 M 上的作用重合，即对 $\boldsymbol{x}\in M$，$\psi(\boldsymbol{V})$ 满足关系：

$$\psi(\boldsymbol{V})\mid_x = \left.\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\right|_{t=0} \Psi(\exp(t\boldsymbol{V}),\boldsymbol{x}) = \mathrm{d}\Psi_x(\boldsymbol{V}\mid_e) \tag{5.89}$$

式中，$\Psi_x(g) \equiv \Psi(g,\boldsymbol{x})$。进一步注意到，由于在有定义的地方，有如下等式成立：

$$\Psi_x \circ R_g(h) = \Psi(h \circ g, x) = \Psi(h, g \circ \boldsymbol{x}) = \Psi_{g\circ x}(h) \tag{5.90}$$

从而对任意 $g \in G$，有

$$\mathrm{d}\Psi_x(\boldsymbol{V}\mid_g) = \mathrm{d}\Psi_{g\circ x}(\boldsymbol{V}\mid_e) = \psi(\boldsymbol{V})\mid_{g\circ x} \tag{5.91}$$

由李括号的性质即式(5.51)可知，ψ 是 g 到 M 上的向量场的李代数的一个李代数同态，即

$$[\psi(\boldsymbol{V}),\ \psi(\boldsymbol{W})] = \psi([\boldsymbol{V},\boldsymbol{W}]),\quad \boldsymbol{V},\boldsymbol{W} \in g \tag{5.92}$$

所以，一切与 $\boldsymbol{V} \in g$ 对应的向量场 $\psi(\boldsymbol{V})$ 组成的集合形成 M 上的向量场的一个李代数，它与 g 同构；特别是具有与 g 相同的结构常数。反之给定 M 上一个有限维向量场李代数，总存在一个局部变换群，其无穷小作用由已知李代数生成。因此有下面的定理。

定理 5.15 设 $\boldsymbol{W}_1,\cdots,\boldsymbol{W}_r$ 是流形 M 上的满足如下关系的向量场：

$$[\boldsymbol{W}_i,\boldsymbol{W}_j] = \sum_{k=1}^{r} c_{ij}^k \boldsymbol{W}_k,\quad i,j = 1,\cdots,r$$

式中，c_{ij}^k 是常数。那么存在一个李群 G，其李代数以 c_{ij}^k 为相对于某组基 $\boldsymbol{V}_1,\cdots,\boldsymbol{V}_r$ 的结构常数，并且 G 在 M 上的局部群作用使得 $\psi(\boldsymbol{V}_i) = \boldsymbol{W}_i$，$i = 1,\cdots,r$，$\psi$ 由式(5.89)定义。

通常，忽略对映射 ψ 的明显依赖，而把李代数 g 和它的像 $\psi(g)$ 视为等同。这样，通过下面的公式从群变换可以重新得到 g，即

$$\boldsymbol{V}\mid_x = \left.\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\right|_{t=0} \exp(t\boldsymbol{V})\boldsymbol{x},\quad \boldsymbol{V} \in g \tag{5.93}$$

g 中的向量场 $\boldsymbol{V}$ 叫做 G 的群作用的一个无穷小生成元。定理 5.15

表明，只要已知形成一个李代数的基的无穷小生成元$\boldsymbol{W}_1,\cdots,\boldsymbol{W}_r$，那么总能通过取指数求得一个局部变换群，其李代数与已知李代数相同。

【例 5.21】　若把微分同胚的李代数视为相同的李代数，则李曾经证明，实直线$M=\boldsymbol{R}$上的向量场恰好存在三个有限维李代数，它们是：

(1) 由∂_x张成的李代数，生成$\boldsymbol{R}$在M上的作用是单参数平移变换群：$x\to x+t$。

(2) 由∂_x和$x\partial_x$张成的二维李代数，第二个向量场产生伸缩变换群：$x\to\lambda x$。由于$[\partial_x, x\partial_x]=\partial_x$，这个李代数同构于下面两个矩阵张成的$2\times2$矩阵李代数，即

$$\begin{bmatrix}0 & 1\\0 & 0\end{bmatrix}\quad 和\quad\begin{bmatrix}1 & 0\\0 & 0\end{bmatrix}$$

这个李代数产生的李群由一切形式如下的上三角矩阵构成：

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}\alpha & \beta\\0 & 1\end{bmatrix},\quad \alpha>0$$

在$\boldsymbol{R}$上的相应群作用是$x\to\alpha x+\beta$。

(3) 由$\boldsymbol{V}_1=\partial_x$，$\boldsymbol{V}_2=x\partial_x$和$\boldsymbol{V}_3=x^2\partial_x$张成的三维李代数。第三个向量场生成局部反演变换群，即

$$x\to\frac{x}{1-tx},\quad |t|<\frac{1}{x}$$

这个三维李代数的交换子表见表 5.2。

表 5.2　交换子

	$\boldsymbol{V}_1$	$\boldsymbol{V}_2$	$\boldsymbol{V}_3$
$\boldsymbol{V}_1$	0	$\boldsymbol{V}_1$	$2\boldsymbol{V}_2$
$\boldsymbol{V}_2$	$-\boldsymbol{V}_1$	0	$\boldsymbol{V}_3$
$\boldsymbol{V}_3$	$-2\boldsymbol{V}_2$	$-\boldsymbol{V}_3$	0

如果用$-V_3=-x^2\partial_x$替换V_3，可得与李代数$SL(2)$相同的交换子表，$SL(2)$的基为

$$A_1=\begin{bmatrix}0&1\\0&0\end{bmatrix},\quad A_2=\begin{bmatrix}\frac{1}{2}&0\\0&-\frac{1}{2}\end{bmatrix},\quad A_3=\begin{bmatrix}0&0\\1&0\end{bmatrix}$$

于是存在特殊线性群$SL(2)$在直线上的一个局部作用，以∂_x，$x\partial_x$和$-x^2\partial_x$为无穷小生成元。不难看出这个群作用恰为射影群，即

$$x\to\frac{\alpha x+\beta}{\gamma x+\delta},\quad \begin{bmatrix}\alpha&\beta\\\gamma&\delta\end{bmatrix}\in SL(2)$$

下面简单介绍关于李代数分类的一些结果，它们在实际应用中可以使问题得到很大简化。

从前面叙述可知，李代数完全由它的结构常数确定，两组结构常数确定同一个李代数的充分必要条件是存在矩阵(a_{ij})，使它们满足公式(5.88)。这样李代数的分类问题就转化为相应结构常数的分类化简问题了。

设L是一个三维李代数，V_1,V_2,V_3是它的一组基。L中的李括号相对于这组基确定出的结构常数c_{ij}^k由下式定义：

$$[V_i,V_j]=\sum_{k=1}^{3}c_{ij}^kV_k,\quad i,j=1,2,3 \tag{5.94}$$

c_{ij}^k满足限制条件即式(5.86)和式(5.87)。

现在，希望能通过适当选取一组V_1,V_2,V_3，使得相应的结构常数张量(c_{ij}^k)最简单。从式(5.86)可知，L中的李括号运算由9个常数$c_{ij}^k(i<j)$确定。考虑下面的以a_1,a_2,a_3和$b^{kl}=b^{lk}(k,l=1,2,3)$为未知量的9个线性方程，即

$$c_{ij}^k=\sum_{l=1}^{3}\varepsilon_{ijl}b^{lk}+\delta_j^ka_i-\delta_i^ka_j \tag{5.95}$$

式中，δ_j^k为Kronecker符号，即$\delta_i^i=1$，$\delta_j^k=0(k\neq j)$，而

$$\varepsilon_{ijl}=\begin{cases}1, & \text{当}(i,j,l)\text{ 为偶数置换}\\ -1, & \text{当}(i,j,l)\text{ 为奇置换}\\ 0, & \text{当}(i,j,l)\text{ 中有重复指标}\end{cases}$$

方程组式(5.95) 总是存在实数解 a_1,a_2,a_3 和 $b^{kl}=b^{lk},k,l=1,2,3$,因为容易验证系数行列式不为零。这样通过式(5.95) 可以把原来的 9 个独立结构常数 $c_{ij}^k(i<j)$ 用对称矩阵 $\boldsymbol{B}=(b^{ij})$ 和向量 $\boldsymbol{a}=(a_i)$ 重新表示。这种表示的好处在于,当用式(5.95) 的等号右端代入条件式(5.87) 后,不难得出 a_i, b^{ij} 满足的相应条件为

$$\sum_{j=1}^{3}b^{ij}a_j=0,\quad i=1,2,3 \tag{5.96}$$

或

$$\boldsymbol{Ba}=0$$

式(5.96) 表明 $\boldsymbol{a}$ 或是零向量或是对称矩阵 $\boldsymbol{B}$ 的对应于零特征值的特征向量。如果选取李代数 L 的另一组基 $\hat{\boldsymbol{V}}_1,\hat{\boldsymbol{V}}_2,\hat{\boldsymbol{V}}_3$,它们与原来的基满足变换关系

$$\hat{\boldsymbol{V}}_i=\sum_{j=1}^{3}t_{ij}\boldsymbol{V}_j,\quad i=1,2,3 \tag{5.97}$$

式中,矩阵 $\boldsymbol{T}=(t_{ij})$ 是可逆的。新的结构常数为

$$\hat{c}_{ij}^k=\sum_{l,m,n=1}^{3}t_{il}t_{jm}\tau_{nk}c_{lm}^n \tag{5.98}$$

式中,$\boldsymbol{T}^{-1}=(\tau_{ij})$ 是 $\boldsymbol{T}$ 的逆矩阵。在变换式(5.97) 下,式(5.96) 变为

$$\sum_{j=1}^{3}d_{ij}r_j=0,\quad i=1,2,3 \tag{5.99}$$

或记作

$$\boldsymbol{Dr}=0 \tag{5.100}$$

式中,$\boldsymbol{D}=(d_{ij})=\boldsymbol{TBT}^{\mathrm{T}}$, $\boldsymbol{r}=\boldsymbol{Ta}=(r_i)$。

由于 $\boldsymbol{B}$ 为对称矩阵,可以适当选取正交矩阵 $\boldsymbol{T}$ 使得 $\boldsymbol{TBT}^{\mathrm{T}}$ 为对角矩阵,即

$$\boldsymbol{D}=\boldsymbol{TBT}^{\mathrm{T}}=\mathrm{diag}(b^{(i)}) \tag{5.101}$$

且

$$\boldsymbol{Ta}=(a,0,0) \tag{5.102}$$

在这种选择下，式(5.99)进一步简化为

$$b^{(1)}a = 0, \quad 即 \quad b^{(1)} = 0 \text{ 或 } a = 0 \tag{5.103}$$

总之，当取正交变换式(5.97)满足条件式(5.101)和式(5.102)时，在新基 $\hat{\boldsymbol{V}}_1, \hat{\boldsymbol{V}}_2, \hat{\boldsymbol{V}}_3$ 下，李括号为

$$[\hat{\boldsymbol{V}}_1, \hat{\boldsymbol{V}}_2] = a\hat{\boldsymbol{V}}_2 + b^{(3)}\hat{\boldsymbol{V}}_3$$

$$[\hat{\boldsymbol{V}}_2, \hat{\boldsymbol{V}}_3] = b^{(1)}\hat{\boldsymbol{V}}_1$$

$$[\hat{\boldsymbol{V}}_3, \hat{\boldsymbol{V}}_1] = b^{(2)}\hat{\boldsymbol{V}}_2 - a\hat{\boldsymbol{V}}_3$$

其交换子表见表 5.3。

表 5.3 交换子

	$\hat{\boldsymbol{V}}_1$	$\hat{\boldsymbol{V}}_2$	$\hat{\boldsymbol{V}}_3$
$\hat{\boldsymbol{V}}_1$	0	$a\hat{\boldsymbol{V}}_2 + b^{(3)}\hat{\boldsymbol{V}}_3$	$a\hat{\boldsymbol{V}}_3 - b^{(2)}\hat{\boldsymbol{V}}_2$
$\hat{\boldsymbol{V}}_2$	$-a\hat{\boldsymbol{V}}_2 - b^{(3)}\hat{\boldsymbol{V}}_3$	0	$b^{(1)}\hat{\boldsymbol{V}}_1$
$\hat{\boldsymbol{V}}_3$	$b^{(2)}\hat{\boldsymbol{V}}_2 - a\hat{\boldsymbol{V}}_3$	$-b^{(1)}\hat{\boldsymbol{V}}_1$	0

在前面讨论的基础上，可以直接从上面表格出发得出三维李代数的分类。上面的表格实际上仅含三个独立参数，通过适当变换，可将某个非零参数化为 1。这样，可根据剩余的参数将三维李代数分为 11 个等价类，见表 5.4。

表 5.4 三维李代数分类

类　别	a	$b^{(1)}$	$b^{(2)}$	$b^{(3)}$	类　别	a	$b^{(1)}$	$b^{(2)}$	$b^{(3)}$
Ⅰ	0	0	0	0	Ⅶ	1	0	0	0
Ⅱ	0	1	0	0	Ⅷ	1	0	0	1
Ⅲ	0	1	1	0	Ⅸ	a	0	1	1
Ⅳ	0	1	−1	0	Ⅹ($a = 1$)	a	0	1	−1
Ⅴ	0	1	1	1	Ⅺ($a \neq 1$)	a	0	1	−1
Ⅵ	0	1	1	−1					

注意第 I 类李代数是三维平移群的李代数，而第 V 类是 $SO(3,\mathbf{R})$ 的李代数。

5.7　本章小结

本章主要介绍了李群李代数的基本概念和理论在微分方程中的应用。在实际应用领域，李群通常是某个研究对象的对称群。更确切地说，李群是作用在某个流形上的局部变换群。在李群理论中的一个重要概念是向量场概念，它可看做是某个单参数李变换群的无穷小生成元。应用这一概念可以简化微分方程中的一些复杂的非线性问题，使得原问题得以求解。

另外，还研究了流形上微分方程的数值解法。强迫数值解满足系统的不变量条件构造了求解微分方程组的新的数值方法。特别地，介绍了投影方法和基于流形的局部坐标化的数值方法。

参考文献

1　李继彬，赵晓华，刘正荣．广义哈密顿理论及其应用．北京：科学出版社，1999

2　Olver P J. Applications of Lie groups to differential equations. New York: Springer Verlag, 1986

3　Hairer E, Lubich C, Wanner G. Geometric numerical integration. Springer-Verlag Berlin, 2002

4　Cohn P M. Lie groups. Cambridge University Press, 1957

5　Hairer E, Wanner G. Solving ordinary differential equations Ⅱ. Stiff and differential-algebraic problems. Springer series in computational mathematics 14, Springer-Verlag Berlin, 1996

第六章　李群上微分方程的积分方法

6.1 引　言

在实际生活中，许多微分方程是在一个李群或流形上通过李群作用而展开的。数值离散这种微分方程时，保持其李群结构是最基本的。本章介绍有关这方面的新的理论与算法。当然，这里不可能包含所有的李群方法，而只是给出它的主要方法的介绍。

考虑一般的李群微分方程，即

$$\dot{\boldsymbol{y}} = \boldsymbol{A}(t,\boldsymbol{y})\boldsymbol{y}, \quad \boldsymbol{y}(0) = \boldsymbol{y}_0 \tag{6.1}$$

式中，$\boldsymbol{y}_0 \in G$，而对于所有的 t 和 $\boldsymbol{y} \in G$，有 $\boldsymbol{A}(t,\boldsymbol{y}) \in g$；另外，$\boldsymbol{A}$ 应当满足 Lipschitz 条件。因为李群是一种特殊的微分流形，所以第五章讲述的投影方法及基于局部坐标的积分方法依然适用。这里将进一步给出保持近似解恒落在原流形上的其他的一些方法，称其为李群方法，主要包括 Crouch-Grossman 方法、Runge-Kutta/Munthe-Kaas(RKMK) 方法[1~2]，基于第二类典则坐标的积分方法及 Magnus 和 Fer 展开方法。另外，特别需要强调的是，把李群微分方程变换为李代数空间的等价微分方程是非常有用的，因为李代数空间是一个线性空间，其李代数结构很容易保持。

应用非常广泛的一类李代数是 $gl(n)$，它是具有矩阵交换子运算的 $n \times n$ 矩阵组成的线性空间。根据 Ado 定理[3~4]，任意有限维李代数都与 $GL(n)$ 的某个李子代数同构，因此，理解或描述抽象的群作用的一个有效途径就是把它们表示为具体的矩阵作用形式。下面讨论矩阵李群上的动力学系统，即

$$\boldsymbol{Y} = \boldsymbol{A}(\boldsymbol{Y},t)\boldsymbol{Y}, \quad \boldsymbol{Y}(0) = \boldsymbol{Y} \tag{6.2}$$

矩阵李群上的微分方程式(6.2)有广泛的应用，譬如，保体积问题，Riccati系统，Sturm-Liouville等问题都需要在李群$SL(n,\boldsymbol{R})$上讨论；讨论刚体力学，计算Lyapunov指数，控制论及数值线性代数都用到李群$O(n,\boldsymbol{R})$；相对论中的$SO(3,1,\boldsymbol{R})$；量子力学中的$SU(n,\boldsymbol{C})$以及Hamilton力学中的$Sp(n)$，等等。通常，把微分方程式(6.2)先变换为李代数g上的微分方程，在g上进行求解，所得数值解由指数映射拉回到李群G，便可得到原微分方程的数值解，这个过程可以在每一个时间步长重复进行，如图6.1所示。

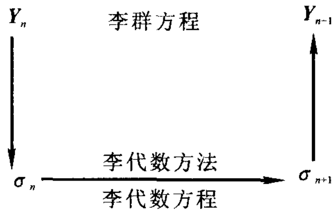


图6.1　求解过程(1)

这里李群上微分方程式(6.2)转换为李代数g上的微分方程，即

$$\dot{\boldsymbol{\sigma}} = \mathrm{dexp}_{\boldsymbol{\sigma}}^{-1}(\boldsymbol{A}(\mathrm{e}^{\boldsymbol{\sigma}}\boldsymbol{Y}_0,t)),\ t \geqslant t_0,\ \boldsymbol{\sigma}(t_0) = \boldsymbol{0} \tag{6.3}$$

而

$$\mathrm{dexp}_{\boldsymbol{\sigma}}^{-1}(\boldsymbol{H}) = \sum_{k\geqslant 0} \frac{B_k}{k!}\boldsymbol{ad}_{\boldsymbol{\sigma}}^{k}\boldsymbol{H} \tag{6.4}$$

B_k为Bernoulli数，而伴随算子$\boldsymbol{ad}_{\boldsymbol{\sigma}}$可如下迭代定义：

$$\boldsymbol{ad}_{\boldsymbol{\sigma}}^{l}\boldsymbol{H} = \begin{cases} \boldsymbol{H}, & l = 0 \\ [\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{ad}_{\boldsymbol{\sigma}}^{l-1}\boldsymbol{H}], & l = 1,2,\cdots \end{cases} \tag{6.5}$$

将微分方程式(6.3)离散以后，可以通过指数映射把$\boldsymbol{\sigma}$值变回到李群G。

李群方法之所以重要还在于它可以推广应用于求解一般齐性空间上的微分方程[5~6]。所谓齐性空间，是一个光滑流形M，并存

在某李群 G 及李群作用 $\lambda:G\times M\to M$，对于所有的 $\boldsymbol{X}_1,\boldsymbol{X}_2\in G$，$\boldsymbol{x}\in M$，满足 $\lambda(\boldsymbol{X}_1,\lambda(\boldsymbol{X}_2,\boldsymbol{x}))=\lambda(\boldsymbol{X}_1\boldsymbol{X}_2,\boldsymbol{x})$，而且对于所有的 $\boldsymbol{x}\in M$，$\lambda(\boldsymbol{I},\boldsymbol{x})=\boldsymbol{x}$ 成立。如果对于任意的 $\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2\in M$，都存在 $\boldsymbol{X}\in G$，使得 $\lambda(\boldsymbol{X},\boldsymbol{x}_1)=\boldsymbol{x}_2$，则称李群作用 λ 是可迁的，具有可迁的李群作用的光滑流形称为齐性空间。齐性空间 M 上的微分方程局部地可以写成如下形式：

$$\dot{\boldsymbol{x}}=\lambda_{\boldsymbol{x}}(\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x},t)),\ t\geqslant t_0,\ \boldsymbol{x}(t_0)=\boldsymbol{x}_0\in M \tag{6.6}$$

式中，$\boldsymbol{F}:M\times R^{+}\to g$ 是 Lipschitz 的（$\boldsymbol{g}$ 是李群 G 的李代数），而映射 $\lambda_{\boldsymbol{x}}:g\to TM$ 的定义如下：

$$\lambda_{\boldsymbol{x}}(\boldsymbol{V})=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\varepsilon}\lambda(\exp(\varepsilon\boldsymbol{V}),\boldsymbol{x})\bigg|_{\varepsilon=0} \tag{6.7}$$

这样，可以首先把齐性空间上的微分方程变换为李群上的微分方程，而后再变换为对应的李代数上的微分方程，在李代数空间求解等价的微分方程而后逐步拉回到原来的齐性空间即得原微分方程的解，如图 6.2 所示。

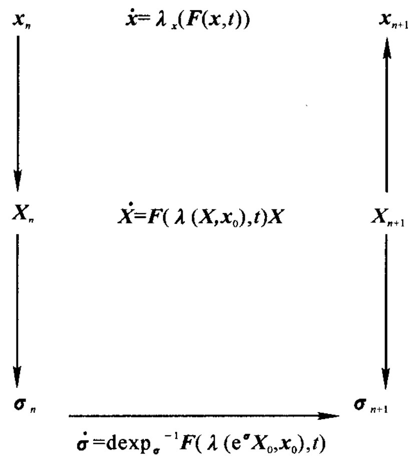


图 6.2　求解过程(2)

6.2　流形上微分方程的 RKMK 方法

首先介绍流形上的微分方程的一般表示。对于流形 M，一定存在李群 G 及李群作用 $\lambda: G\times M\to M$ 及函数 $\boldsymbol{F}: M\times R\to g$ 使得流形 M 上的微分方程可以表示为式(6.6)。它的解由下面命题给出[5]。

命题 6.1　对于足够小的时间 t，流形 M 上的微分方程式(6.6)的解为

$$\boldsymbol{x}(t)=\lambda(\exp\boldsymbol{\sigma}(t),\ \boldsymbol{x}_0) \tag{6.8}$$

式中，$\boldsymbol{\sigma}(t)\in g$ 满足如下微分方程：

$$\dot{\boldsymbol{\sigma}}=\mathrm{dexp}_{\boldsymbol{\sigma}}^{-1}\boldsymbol{F}(\lambda(\exp\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{x}_0),t),\quad \boldsymbol{\sigma}(0)=\boldsymbol{0} \tag{6.9}$$

式中

$$\mathrm{dexp}_{\boldsymbol{\sigma}}^{-1}(\boldsymbol{u})=\sum_{k\geqslant 0}\frac{B_k}{k\,!}\boldsymbol{ad}_{\boldsymbol{\sigma}}^{k}\boldsymbol{u} \tag{6.10}$$

式中，B_k 为由 $\sum_{k\geqslant 0}\left(\frac{B_k}{k\,!}\right)x^k=\frac{x}{(\mathrm{e}^x-1)}$ 定义的伯努利数。

流形上微分方程的 RKMK 方法就是：截断式(6.10)中 $\mathrm{dexp}_{\boldsymbol{\sigma}}^{-1}(\boldsymbol{u})$ 的表达式，并记它的近似表达式为

$$\mathrm{dexp\ inv}(\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{u},p)=\sum_{k=0}^{p-1}\frac{B_k}{k\,!}\boldsymbol{ad}_{\boldsymbol{\sigma}}^{k}(\boldsymbol{u}) \tag{6.11}$$

假设 $a_{i,j}$ 和 b_j 是一个 p 阶 s 级的 Runge-Kutta 方法的系数，且令 $c_i=\sum_{j=1}^{s}a_{i,j}$，那么一个 p 阶的 RKMK 格式如下：

for $i=1,2,\cdots,s$

$$\boldsymbol{\sigma}_i=h\sum_{j=1}^{i-1}a_{i,j}\tilde{\boldsymbol{k}}_j$$

$$\boldsymbol{k}_i=\boldsymbol{F}(\lambda(\exp\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{x}_0),\ hc_i)$$

$$\tilde{\boldsymbol{k}}_i=\mathrm{dexp\ inv}(\boldsymbol{\sigma}_i,\boldsymbol{k}_i,p)$$

end

$$v = h\sum_{j=1}^{s} b_j\tilde{k}_j$$

$$x_1 = \lambda(\exp v,\ x_0)$$

式中，$x_0, x_1 \in M$，而 $\sigma_i, k_i, \tilde{k}_i, v \in g$。由 $x_0 \in M$ 得到了 $x_1 \in M$，如此可逐步迭代。不难证明上述算法至少能达到 p 阶精度。

6.3 Crouch-Grossman 方法

为简化记号，本节与 6.4 节中考虑矩阵李群上的自治系统，即

$$\dot{Y} = A(Y)Y,\quad Y(t_0) = Y_0 \tag{6.12}$$

这些方法不难推广用于求解一般的非自治系统。

传统的显式 Runge-Kutta 方法通过合成两个基本运算而获得：① 计算矢量场 $f(Y) = A(Y)\cdot Y$；② 计算和式 $Y + haf(Z)$。对于李群上的微分方程，这些方法都有缺点，也就是说，即使 $Y \in G$ 且 $Z \in G$，而通常情况下和式 $Y + haf(Z)$ 不再属于原李群空间。例如，最早的 Runge 方法由下面几个步骤构成：计算 $K_1 = f(Y_0)$；计算 $\tilde{Y}_1 = Y_0 + hK_1$；计算 $K_2 = f(\tilde{Y}_1)$；最后计算 $Y_1 = Y_0 + \frac{h}{2}K_1 + \frac{h}{2}K_2$。

李群方法很大程度上要归功于 Peter Crouch 及其合作者的开创性工作，是他们首先系统地介绍了流形上常微分方程的处理办法。Crouch 以及 Grossman 的基本思想[7] 是用 $\exp(haA(Z))Y$ 代替传统方法中的求和计算。

定义 6.1 假设 b_j 和 $a_{i,j}(i,j = 1,\cdots,s)$ 均为实数，一个显式的 s 级 Crouch-Grossman 方法定义为

$$\begin{aligned}
&Y^{(i)} = \exp(ha_{i,i-1}K_{i-1})\times\cdots\times\exp(ha_{i1}K_1)Y_n,\ K_i = A(Y^{(i)})\\
&Y_{n+1} = \exp(hb_sK_s)\times\cdots\times\exp(hb_1K_1)Y_n
\end{aligned} \tag{6.13}$$

例如，上面讨论的Runge-Kutta方法（$s=2, a_{21}=1, b_1=b_2=\frac{1}{2}$）就变为

$$\boldsymbol{Y}_{n+1} = \exp\left(\frac{h}{2}\boldsymbol{K}_2\right)\exp\left(\frac{h}{2}\boldsymbol{K}_1\right)\boldsymbol{Y}_n$$

式中，$\boldsymbol{K}_1 = \boldsymbol{A}(\boldsymbol{Y}_n)$ 而 $\boldsymbol{K}_2 = \boldsymbol{A}(\exp(h\boldsymbol{K}_1)\boldsymbol{Y}_n)$。

如此构造的Crouch-Grossman方法给出的近似解确实落在李群所定义的流形之上，但是它们的精度如何呢？

定理 6.1　令 $c_i = \sum_{j=1}^{s} a_{i,j}$，如果下面的阶条件成立：

$$\sum_{j=1}^{s} b_j = 1 \qquad \text{（一阶条件）}$$

$$\sum_{j=1}^{s} b_j c_j = \frac{1}{2} \qquad \text{（二阶条件）}$$

$$\sum_{j=1}^{s} b_j c_j^2 = \frac{1}{3} \tag{6.14}$$

$$\sum_{i,j=1}^{s} b_i a_{i,j} c_j = \frac{1}{6}$$

$$\sum_{j=1}^{s} b_j^2 c_j + 2\sum_{\substack{i,j=1\\ i<j}}^{s} b_i c_i b_j = \frac{1}{3} \qquad \text{（三阶条件）}$$

上述 Crouch-Grossman 方法则是 p 阶近似方法。

下面是 Crouch 和 Grossman 给出的两个三阶近似格式：

$$\begin{array}{c|ccc}
0 & & & \\
-1/24 & -1/24 & & \\
17/24 & 161/24 & -6 & \\
\hline
 & 1 & -2/3 & 2/3
\end{array}
\qquad
\begin{array}{c|ccc}
0 & & & \\
3/4 & 3/4 & & \\
17/24 & 119/216 & 17/108 & \\
\hline
 & 13/51 & -2/3 & 24/17
\end{array}$$

更高阶的 Crouch-Grossman 方法的构造相当复杂。

6.4 基于第二类典则坐标的积分方法

对于李代数 g 的一组基 $\{C_1, C_2, \cdots, C_n\}$，相应的李群 G 的局部参数化表示 $\psi(z) = \exp\sum_{i=1}^{n} z_i C_i$ 中的 $\{z_1, z_2, \cdots, z_n\}$ 称为第一类典则坐标。这里我们感兴趣的是如下形式的局部参数化表示：

$$\psi(z) = \exp(z_1 C_1)\exp(z_2 C_2) \times \cdots \times \exp(z_n C_n) \tag{6.15}$$

这时，称 $\{z_1, z_2, \cdots, z_n\}$ 为第二类典则坐标[4,8]。根据 C_i 的稀疏特征，$\exp(z_1 C_1)\exp(z_2 C_2) \times \cdots \times \exp(z_n C_n)$ 的计算量可能比 $\exp\sum_{i=1}^{n} z_i C_i$ 要小得多，这就是应用第二类典则坐标来求解李群上微分方程的主要思想[9~10]。

根据坐标变换 $y = \psi(z)$，微分方程式(6.12)变形为 $\psi'(z)\dot{z} = A(\psi(z))\psi(z)$，也就是说式(6.12)等价为如下的微分方程：

$$\begin{aligned} A(\psi(z)) = & \sum_{i=1}^{n} \dot{z}_i \exp(z_1 C_1) \times \cdots \times \exp(z_{i-1} C_{i-1}) \times \\ & C_i \cdot \exp(-z_{i-1} C_{i-1}) \times \cdots \times \exp(-z_1 C_1) = \\ & \sum_{i=1}^{n} \dot{z}_i (F_1 \circ \cdots \circ F_{i-1}) C_i \end{aligned} \tag{6.16}$$

式中，用记号 $F_j C = \exp(z_j C_j) C \exp(-z_j C_j)$ 定义线性算子 $F_j: g \to g$。因此，需要根据式(6.16)来计算 $\{\dot{z}_1, \dot{z}_2, \cdots, \dot{z}_n\}$，这是一项复杂的工作。然而，对于某些李代数，只要选取适当的坐标基，上述计算就会比较简单了。定义 $\hat{F}_j$ 为

$$\hat{F}_j C_i = \begin{cases} F_j C_i, & i > j \\ C_i, & i \leqslant j \end{cases} \tag{6.17}$$

并假设

$$(\boldsymbol{F}_1 \circ \cdots \circ \boldsymbol{F}_{i-1})\boldsymbol{C}_i = (\hat{\boldsymbol{F}}_1 \circ \cdots \circ \hat{\boldsymbol{F}}_{i-1})\boldsymbol{C}_i,\ i = 2,\cdots,n \tag{6.18}$$

根据该假设，可得$(\boldsymbol{F}_1 \circ \cdots \circ \boldsymbol{F}_{i-1})\boldsymbol{C}_i = (\hat{\boldsymbol{F}}_1 \circ \cdots \circ \hat{\boldsymbol{F}}_{i-1})\boldsymbol{C}_i = (\hat{\boldsymbol{F}}_1 \circ \cdots \circ \hat{\boldsymbol{F}}_{n-1})\boldsymbol{C}_i$，那么，式(6.16)变为

$$(\hat{\boldsymbol{F}}_1 \circ \cdots \circ \hat{\boldsymbol{F}}_{n-1})\left(\sum_{i=1}^{n} \dot{z}_i \boldsymbol{C}_i\right) = \boldsymbol{A}(\psi(\boldsymbol{z})) \tag{6.19}$$

大家知道，算子$\hat{\boldsymbol{F}}_j$的逆算子很容易求出，那么，简化微分方程式(6.19)后即可用任意数值方法$\boldsymbol{\Phi}_h$进行求解，得到$\tilde{\boldsymbol{z}}_{n+1} = \boldsymbol{\Phi}_h(\boldsymbol{z}_n)$；再通过$\boldsymbol{y}_{n+1} = \psi(\tilde{\boldsymbol{z}}_{n+1})$来求原问题的数值解。其中主要的困难在于要找到可以适当排序的坐标基满足条件式(6.18)，详细资料请见文献[9,10]。

6.5　Magnus 展开方法

6.5.1　Magnus 展开式

前面两节讨论了李群上微分方程式(6.12)的数值求解问题。下面讨论矩阵微分方程，即

$$\dot{\boldsymbol{U}} = \boldsymbol{A}(t)\boldsymbol{U},\quad \boldsymbol{U}(t_0) = \boldsymbol{U}_0 = \boldsymbol{I} \tag{6.20}$$

式中，$\boldsymbol{A}(t)$表示足够光滑的矩阵(或线性算子)。

对于最简单的线性微分方程$\dot{x} = a(t)x,\ x(0) = x_0$，它的解是$x(t) = \exp\int_0^t a(s)\mathrm{d}s \cdot x_0$。而数量取指数运算可以非常容易推广到矩阵取指数，所以，人们希望矩阵微分方程式(6.20)的解可以局部地表示为

$$\boldsymbol{U}(t) = \exp\int_0^t \boldsymbol{A}(s)\mathrm{d}s \cdot \boldsymbol{U}_0 \tag{6.21}$$

这里的 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{U},\boldsymbol{U}_0$ 均为矩阵。

如果对于所有的 $t_1,t_2\geqslant 0$,都有 $[\boldsymbol{A}(t_1),\boldsymbol{A}(t_2)]\equiv\boldsymbol{0}$,那么,上述做法是正确的。然而,大多数的矩阵 $\boldsymbol{A}$ 没有上述性质。但是,大家知道,$\boldsymbol{A}\in g$, $\boldsymbol{U}\in G$, 方程式(6.20) 称为一个李群方程。而式(6.21) 中的 $\boldsymbol{U}\in G$, 为此,希望在保持该特征的基础上,对式(6.21) 中 $\boldsymbol{U}$ 进行修正。对它的修正有两个途径:一个是在李代数空间进行,即令

$$\boldsymbol{U}(t)=\exp\left(\int_0^t\boldsymbol{A}(s)\mathrm{d}s+\Delta(t)\right)\boldsymbol{U}_0 \tag{6.22}$$

上式即 Magnus 展开式的思想。另一个途径为在李群上进行修正,即

$$\boldsymbol{U}(t)=\exp\left(\int_0^t\boldsymbol{A}(s)\mathrm{d}s\right)\boldsymbol{V}(t) \tag{6.23}$$

该式即为后面要讲到的 Fer 展开式的思想。

定理 6.2 (Magnus,1954) 矩阵微分方程式(6.20) 的解可以表示为

$$\boldsymbol{U}(t)=\exp(\boldsymbol{\Omega}(t))\boldsymbol{U}_0 \tag{6.24}$$

式中,$\boldsymbol{\Omega}$ 满足

$$\dot{\boldsymbol{\Omega}}=\mathrm{dexp}_{\boldsymbol{\Omega}}^{-1}(\boldsymbol{A}(t)),\quad \boldsymbol{\Omega}(0)=0 \tag{6.25}$$

而

$$\mathrm{dexp}_{\boldsymbol{\Omega}}^{-1}(\boldsymbol{H})=\sum_{k\geqslant 0}\frac{B_k}{k!}\boldsymbol{ad}_{\boldsymbol{\Omega}}^k\boldsymbol{H} \tag{6.26}$$

式中,B_k 为伯努利数;$\boldsymbol{ad}_{\boldsymbol{\Omega}}(\boldsymbol{A})=[\boldsymbol{\Omega},\boldsymbol{A}]=\boldsymbol{\Omega}\boldsymbol{A}-\boldsymbol{A}\boldsymbol{\Omega}$ 是伴随算子。而且,如果 $\|\boldsymbol{\Omega}\|<\pi$,展开式式(6.26) 是收敛的。

证明 对 $\boldsymbol{U}(t)=\exp(\boldsymbol{\Omega}(t))\boldsymbol{U}_0$ 进行微分,可得

$$\dot{\boldsymbol{U}}=\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\boldsymbol{\Omega}}\exp\boldsymbol{\Omega}(t)\right)\dot{\boldsymbol{\Omega}}(t)\boldsymbol{U}_0=(\mathrm{dexp}_{\boldsymbol{\Omega}}(\dot{\boldsymbol{\Omega}}(t)))\exp\boldsymbol{\Omega}(t)\boldsymbol{U}_0$$

结合式(6.24),与式(6.20) 进行比较,可得

$$\boldsymbol{A}(t)=\mathrm{dexp}(\dot{\boldsymbol{\Omega}}(t))$$

对它的两边应用逆算子 $\mathrm{dexp}_{\boldsymbol{\Omega}}^{-1}$，即可得到微分方程式(6.25)。而关于式(6.26)的收敛性的结论是第三章中定理3.7的结论。

用 Picard 迭代方法来求解微分方程式(6.25)，以求得原微分方程式(6.20)的解。这里有

$$\boldsymbol{\Omega}^{(0)}(t)=0$$

$$\boldsymbol{\Omega}^{[m+1]}(t)=\int_0^t \mathrm{dexp}_{\boldsymbol{\Omega}}^{-1}(\boldsymbol{A}(s))\mathrm{d}s=$$

$$\sum_{k=0}^{\infty}\frac{B_k}{k!}\int_0^t ad_{\boldsymbol{\Omega}^{[m]}(s)}^k\boldsymbol{A}(s)\mathrm{d}s,\ m=0,1,\cdots$$

于是得到

$$\boldsymbol{\Omega}^{[1]}(t)=\int_0^t\boldsymbol{A}(s)\mathrm{d}s$$

$$\boldsymbol{\Omega}^{[2]}(t)=\int_0^t\boldsymbol{A}(\xi)\mathrm{d}\xi-\frac{1}{2}\int_0^t\int_0^{\xi_1}[\boldsymbol{A}(\xi_2),\boldsymbol{A}(\xi_1)]\mathrm{d}\xi_2\mathrm{d}\xi_1+$$
$$\frac{1}{12}\int_0^t\left[\int_0^{\xi_1}\boldsymbol{A}(\xi_2)\mathrm{d}\xi_2,\left[\int_0^{\xi_1}\boldsymbol{A}(\xi_2)\mathrm{d}\xi_2,\boldsymbol{A}(\xi_1)\right]\right]\mathrm{d}\xi_1+\cdots$$

$$\boldsymbol{\Omega}^{[3]}(t)=\int_0^t\boldsymbol{A}(\xi)\mathrm{d}\xi-\frac{1}{2}\int_0^t\int_0^{\xi_1}[\boldsymbol{A}(\xi_2),\boldsymbol{A}(\xi_1)]\mathrm{d}\xi_2\mathrm{d}\xi_1+$$
$$\frac{1}{12}\int_0^t\left[\int_0^{\xi_1}\boldsymbol{A}(\xi_2)\mathrm{d}\xi_2,\left[\int_0^{\xi_1}\boldsymbol{A}(\xi_2)\mathrm{d}\xi_2,\boldsymbol{A}(\xi_1)\right]\right]\mathrm{d}\xi_1+$$
$$\frac{1}{4}\int_0^t\int_0^{\xi_1}\int_0^{\xi_2}[[\boldsymbol{A}(\xi_3),\boldsymbol{A}(\xi_2)],\boldsymbol{A}(\xi_1)]\mathrm{d}\xi_3\mathrm{d}\xi_2\mathrm{d}\xi_1-$$
$$\frac{1}{24}\int_0^t\left[\int_0^{\xi_1}\left[\int_0^{\xi_2}\boldsymbol{A}(\xi_3)\mathrm{d}\xi_3,\left[\int_0^{\xi_2}\boldsymbol{A}(\xi_3)\mathrm{d}\xi_3,\boldsymbol{A}(\xi_2)\right]\right]\times\right.$$
$$\left.\mathrm{d}\xi_2,\boldsymbol{A}(\xi_1)\right]\mathrm{d}\xi_1-\frac{1}{24}\int_0^t\left[\int_0^{\xi_1}\left[\int_0^{\xi_2}\boldsymbol{A}(\xi_3)\mathrm{d}\xi_3,\boldsymbol{A}(\xi_2)\right]\times\right.$$
$$\left.\mathrm{d}\xi_2,\left[\int_0^{\xi_1}\boldsymbol{A}(\xi_2)\mathrm{d}\xi_2,\boldsymbol{A}(\xi_1)\right]\right]\mathrm{d}\xi_1-$$
$$\frac{1}{24}\int_0^t\left[\int_0^{\xi_1}\boldsymbol{A}(\xi_2)\mathrm{d}\xi_2,\left[\int_0^{\xi_1}\left[\int_0^{\xi_2}\boldsymbol{A}(\xi_3)\mathrm{d}\xi_3,\boldsymbol{A}(\xi_2)\right]\times\right.\right.$$
$$\left.\left.\mathrm{d}\xi_2,\boldsymbol{A}(\xi_1)\right]\right]\mathrm{d}\xi_1+\cdots$$

根据 Picard 迭代理论，在原点的一个足够小的邻域，$\lim\limits_{m\to\infty}\boldsymbol{\Omega}^{[m]}(t)$ 存在，且式(6.24) 中的 $\boldsymbol{\Omega}(t)=\lim\limits_{m\to\infty}\boldsymbol{\Omega}^{[m]}(t)$，它就是 Magnus 展开式，可以表示为

$$\boldsymbol{\Omega}(t)=\sum_{k=1}^{\infty}\boldsymbol{\Omega}_k(t)$$

式中

$$\boldsymbol{\Omega}_1(t)=\int_0^t\boldsymbol{A}(s)\mathrm{d}s$$

$$\boldsymbol{\Omega}_2(t)=-\frac{1}{2}\int_0^t\left[\int_0^{\xi_1}\boldsymbol{A}(\xi_2)\mathrm{d}\xi_2,\boldsymbol{A}(\xi_1)\right]\mathrm{d}\xi_1$$

$$\boldsymbol{\Omega}_3(t)=\frac{1}{12}\int_0^t\left[\int_0^{\xi_1}\boldsymbol{A}(\xi_2)\mathrm{d}\xi_2,\left[\int_0^{\xi_1}\boldsymbol{A}(\xi_2)\mathrm{d}\xi_2,\boldsymbol{A}(\xi_1)\right]\right]\mathrm{d}\xi_1+$$
$$\frac{1}{4}\int_0^t\int_0^{\xi_1}\int_0^{\xi_2}[[\boldsymbol{A}(\xi_3),\boldsymbol{A}(\xi_2)],\boldsymbol{A}(\xi_1)]\mathrm{d}\xi_3\mathrm{d}\xi_2\mathrm{d}\xi_1$$

$$\boldsymbol{\Omega}_4(t)=-\frac{1}{24}\int_0^t\left[\int_0^{\xi_1}\left[\int_0^{\xi_2}\boldsymbol{A}(\xi_3)\mathrm{d}\xi_3,\left[\int_0^{\xi_2}\boldsymbol{A}(\xi_3)\mathrm{d}\xi_3,\boldsymbol{A}(\xi_2)\right]\right]\times\right.$$
$$\left.\mathrm{d}\xi_2,\boldsymbol{A}(\xi_1)\right]\mathrm{d}\xi_1-\frac{1}{24}\int_0^t\left[\int_0^{\xi_1}\left[\int_0^{\xi_2}\boldsymbol{A}(\xi_3)\mathrm{d}\xi_3,\boldsymbol{A}(\xi_2)\right]\times\right.$$
$$\left.\mathrm{d}\xi_2,\left[\int_0^{\xi_1}\boldsymbol{A}(\xi_2)\mathrm{d}\xi_2,\boldsymbol{A}(\xi_1)\right]\right]\mathrm{d}\xi_1-$$
$$\frac{1}{24}\int_0^t\left[\int_0^{\xi_1}\boldsymbol{A}(\xi_2)\mathrm{d}\xi_2,\left[\int_0^{\xi_1}\left[\int_0^{\xi_2}\boldsymbol{A}(\xi_3)\mathrm{d}\xi_3,\boldsymbol{A}(\xi_2)\right]\times\right.\right.$$
$$\left.\left.\mathrm{d}\xi_2,\boldsymbol{A}(\xi_1)\right]\right]\mathrm{d}\xi_1-$$
$$\frac{1}{8}\int_0^t\left[\int_0^{\xi_1}\boldsymbol{A}(\xi_2)\mathrm{d}\xi_2,\left[\int_0^{\xi_1}\boldsymbol{A}(\xi_2)\times\right.\right.$$
$$\left.\left.\mathrm{d}\xi_2,\left[\int_0^{\xi_1}\boldsymbol{A}(\xi_2)\mathrm{d}\xi_2,\boldsymbol{A}(\xi_1)\right]\right]\right]\mathrm{d}\xi_1$$

因此，矩阵微分方程 $\dot{\boldsymbol{U}}=\boldsymbol{A}(t)\boldsymbol{U}$，$\boldsymbol{U}(t_0)=\boldsymbol{U}_0=\boldsymbol{I}$ 的解为

$$\boldsymbol{U}(t)=\exp(\boldsymbol{\Omega}(t))\boldsymbol{U}_0$$

6.5.2 Magnus 级数展开与平面双枝树的关系

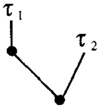
A. Iserles 和 S. P. Nφrsett 在文献[11]中把 Magnus 级数展开式中的各项与不同的平面双枝树联系起来，给出了一种迭代生成 Magnus 级数高阶项的有效方法，这对于正确写出矩阵微分方程的解的 Magnus 展开式及进一步约化展开式中的交换子运算非常有用。他们把 Magnus 展开式重新写成如下形式：

$$\boldsymbol{\Omega}(t) = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{\tau \in T_k} \alpha(\tau) \int_0^t \boldsymbol{H}_\tau(\xi) \mathrm{d}\xi, \ t \geqslant 0 \tag{6.27}$$

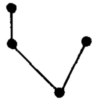
式中，每个 $\boldsymbol{H}_\tau$，$\tau \in T_k$ 均是关于 $\boldsymbol{A}(t)$ 的 k 重交换子的 k 重积分，$\alpha(\tau)$ 是标量。根据 Picard 迭代过程，不难发现，可以进行如下迭代生成 $\boldsymbol{H}_\tau$：

(1) 定义仅有一个结点(vertex)的根树为 $T_0 = \{\tau_0\} = \{\bullet\}$，即用一个结点表示 $\boldsymbol{A}(t)$，即 $\bullet \longrightarrow \boldsymbol{H}_{\tau_0}(t) = \boldsymbol{A}(t)$；

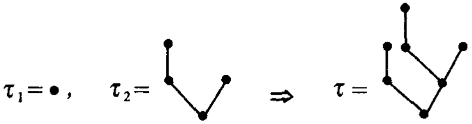
(2) 如果 $\tau_1 \in T_{m_1}$，而 $\tau_2 \in T_{m_2}$，且 $m_1 + m_2 = m - 1$，那么可以迭代定义 T_m 为

$\tau =$  $\in T_m \longrightarrow \boldsymbol{H}_\tau(t) = \left[\int_0^t \boldsymbol{H}_{\tau_1}(\xi)\mathrm{d}\xi, \ \boldsymbol{H}_{\tau_2}(t)\right]$

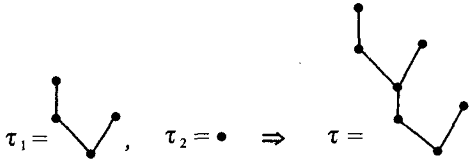
这样，结合根树理论，可以写出 Magnus 展开的所有的级数项。具体地，构造 T_1，它只包含一棵树，即

$\tau_1 = \bullet$，$\tau_2 = \bullet \Rightarrow \tau =$ 

对于构造 T_2，有两种可能性：$m_1 = 0, m_2 = 1$ 和 $m_1 = 1, m_2 = 0$，于是，有

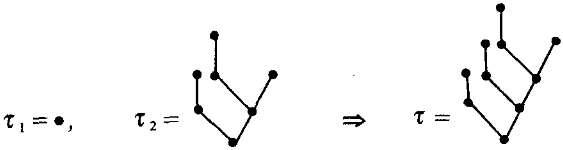


$\tau_1 = \bullet$,　$\tau_2 =$　$\Rightarrow$　$\tau =$

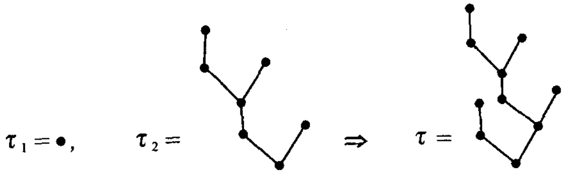


$\tau_1 =$　,　$\tau_2 = \bullet$　$\Rightarrow$　$\tau =$

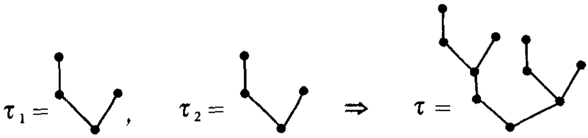
下面构造 T_3:



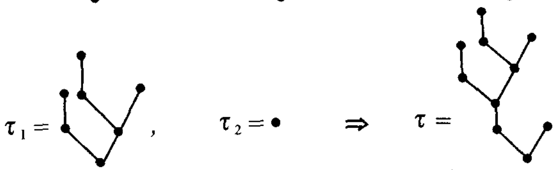
$\tau_1 = \bullet$,　$\tau_2 =$　$\Rightarrow$　$\tau =$



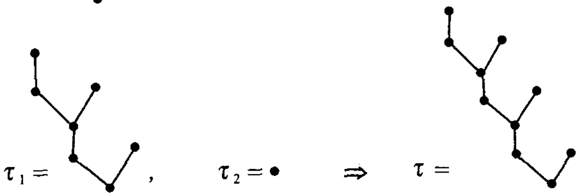
$\tau_1 = \bullet$,　$\tau_2 =$　$\Rightarrow$　$\tau =$



$\tau_1 =$　,　$\tau_2 =$　$\Rightarrow$　$\tau =$

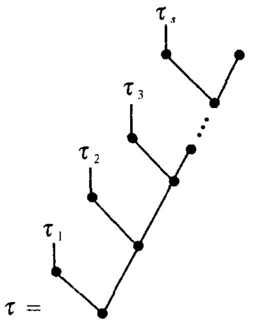


$\tau_1 =$　,　$\tau_2 = \bullet$　$\Rightarrow$　$\tau =$



$\tau_1 =$　,　$\tau_2 = \bullet$　$\Rightarrow$　$\tau =$

综上所述，不难发现根树的构造规律，要完成式(6.27)的 Magnus 级数展开式，还需要计算对应于不同的根树 τ 的系数 $\alpha(\tau)$。令 $\alpha(\bullet) = 1$，不同结点的根树相应的系数可以迭代计算。仔细观察，不难发现 $\bigcup_{k\in N} T_k$ 中的所有的根树都可以写成如下统一的形式：

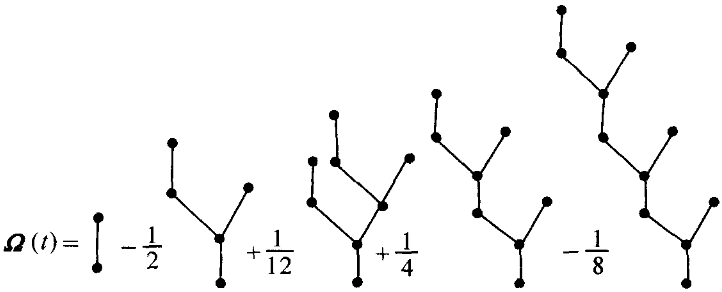


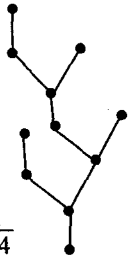
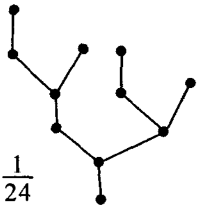
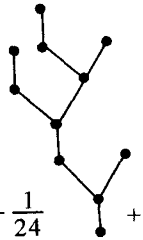
(6.28)

文献[11]证明了对于所有的 $i = 1,2,\cdots,s$，如果已经知道 $\alpha(\tau_i)$，那么，式(6.28)中的根树 τ 对应的系数为

$$\alpha(\tau) = \frac{B_s}{s!}\prod_{i=1}^{s}\alpha(\tau_i) \tag{6.29}$$

因此，可以根据根树的不断增长来写出展开式。因为对于所有的 $m \geqslant 1$，都有 $B_{2m+1} = 0$，所以式(6.27)中的许多项等于零。下面用根树的形式写出 Magnus 级数展开式(6.27)的前几项，即



$-\frac{1}{24}$  $-\frac{1}{24}$  $-\frac{1}{24}$  $+\cdots$ (6.30)

展开式(6.30)没有包含 T_3 中的最后一棵树，因为根据式(6.29)它的系数为零。

应当强调，如果矩阵 $\boldsymbol{A}(t)$ 有界，且 $\|\boldsymbol{A}(t)\|$ 逐段光滑，那么在满足

$$K(t)=\int_{t_0}^{t}\|\boldsymbol{A}(\tau)\|\,\mathrm{d}\tau<\xi\equiv 1.086\,869$$

时间 t 的范围内 Magnus 级数绝对收敛。

不难证明，对于足够光滑的矩阵函数 $\boldsymbol{A}$，有如下估计：

$$\tau\in T_k\Rightarrow\int_0^t \boldsymbol{H}_\tau(\xi)\mathrm{d}\xi=O(t^{k+1}) \tag{6.31}$$

据此，可以适当截断 Magnus 展开式来获得一定精度要求的近似表示。

6.6 Fer 展开式

本节希望在李群上修正 $\boldsymbol{U}(t)=\exp\int_0^t\boldsymbol{A}(s)\mathrm{d}s\cdot\boldsymbol{U}_0$ 来求得矩阵微分方程式(6.20)的解 $\boldsymbol{U}(t)=\exp\left(\int_0^t\boldsymbol{A}(s)\mathrm{d}s\right)\boldsymbol{V}(t)$，记 $\boldsymbol{F}(t)=\int_0^t\boldsymbol{A}(s)\mathrm{d}s$，直接对修正解进行微分，并应用

$$\frac{\partial}{\partial t}\exp(\boldsymbol{D})=\int_0^1\exp(s\boldsymbol{D})\dot{\boldsymbol{D}}\exp[(1-s)\boldsymbol{D}]\mathrm{d}s \tag{6.32}$$

可得

$$\begin{aligned}\dot{\boldsymbol{V}} &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\exp(-\boldsymbol{F}))\boldsymbol{U} + \exp(-\boldsymbol{F})\dot{\boldsymbol{U}} = \\ &\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\exp(-\boldsymbol{F}))\exp\boldsymbol{F}\boldsymbol{V} + \exp(-\boldsymbol{F})\boldsymbol{A}\exp\boldsymbol{F}\boldsymbol{V} = \\ &\Big(\exp(-\boldsymbol{F})\boldsymbol{A}\exp\boldsymbol{F} - \int_0^1 \exp(-s\boldsymbol{F})\dot{\boldsymbol{F}}\cdot \\ &\quad \exp((-1+s)\boldsymbol{F})\exp\boldsymbol{F}\mathrm{d}s\Big)\boldsymbol{V} = \\ &\Big(\exp(-\boldsymbol{F})\boldsymbol{A}\exp\boldsymbol{F} - \int_0^1 \exp(-s\boldsymbol{F})\dot{\boldsymbol{F}}\exp s\boldsymbol{F}\mathrm{d}s\Big)\boldsymbol{V}\end{aligned} \tag{6.33}$$

而

$$\dot{\boldsymbol{F}} = \boldsymbol{A} \tag{6.34}$$

考虑到公式 $\exp(\boldsymbol{X})\boldsymbol{Y}\mathrm{epx}(-\boldsymbol{X}) = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{k!}[\boldsymbol{X}^k,\boldsymbol{Y}]$,可得关于 $\boldsymbol{V}$ 的微分方程为

$$\dot{\boldsymbol{V}} = \Big[\sum_{k=1}^{\infty}(-1)^k\frac{k}{(k+1)!}[\boldsymbol{F}^k,\boldsymbol{A}]\Big]\boldsymbol{V},\ t \geqslant 0,\ \boldsymbol{V}(0) = \boldsymbol{U}_0 \tag{6.35}$$

根据式(6.35)进行迭代,记 $\boldsymbol{A}_0(t) = \boldsymbol{A}(t)$,生成序列 $\{\boldsymbol{A}_n\}_{n\in N}$ 及 $\{\boldsymbol{F}_n\}_{n\in Z^+}$, $\boldsymbol{F}_{n+1}(t) = \int_{t_0}^{t}\boldsymbol{A}_n(s)\mathrm{d}s,\ n = 0,1,2,\cdots$,且

$$\boldsymbol{A}_{n+1} = \sum_{j=1}^{\infty}\frac{(-1)^j j}{(j+1)!}[\boldsymbol{F}_{n+1}^j,\boldsymbol{A}_n],\ n = 0,1,2,\cdots \tag{6.36}$$

那么,微分方程式(6.20)的解的 Fer 展开式为

$$\boldsymbol{U}(t) = \exp\Big(\int_0^t \boldsymbol{A}(s)\mathrm{d}s\Big)\boldsymbol{V}(t) = \exp\boldsymbol{F}_1\exp\boldsymbol{F}_2\exp\boldsymbol{F}_3\cdots\boldsymbol{U}_0 \tag{6.37}$$

根据 Fer 展开式来构造微分方程的数值解,首先要分析它的收敛性。式(6.36)又可以写为

$$\boldsymbol{A}_m = \sum_{j=1}^{\infty}\frac{(-1)^j j}{(j+1)!}\Big[\Big(\int_0^t \boldsymbol{A}_{m-1}\Big)^j,\ \boldsymbol{A}_{m-1}\Big],\ m = 1,2,\cdots$$

假设对于 $m \in Z^{+}$，有 $\boldsymbol{F}_m(t) = O(t^{p_m})$，那么由上式可知：$p_m = 2p_{m-1} + 2$。由 $p_0 = 0$，可以推得 $p_m = 2^{m+1} - 2$，于是有

$$\exp\boldsymbol{F}_1 \exp\boldsymbol{F}_2 \times \cdots \times \exp\boldsymbol{F}_m \boldsymbol{U}_0 = \boldsymbol{U}(t) + O(t^{2^{m+1}-1}) \tag{6.38}$$

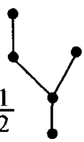
由此可见，基于上述截断的 Fer 展开式构造数值方法可得 $2^{m+1} - 2$ 阶计算精度，随着 m 的增加，计算精度将指数增长。当然，构造 p 阶近似方法并不需要计算更高阶的项。类似于 Magnus 展开式与双枝树的联系，即依然用仅由一个结点组成的根树来表示矩阵 $\boldsymbol{A}(t)$，文献[12]给出了 Fer 展开式与双枝树的对应关系，下面用根树形式给出不同精度要求的 Fer 展开式，即式(6.37)中的 $\boldsymbol{F}_i(t)$，$i = 1,2,\cdots$ 的近似表达式。

二阶近似：$m = 1$，

$$\boldsymbol{F}_1(t) = \int_0^t \boldsymbol{A}(\xi)\mathrm{d}\xi:$$ 

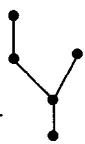
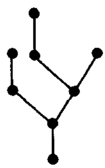
三阶近似：$m = 2$，

$\boldsymbol{F}_1(t)$： 

$\boldsymbol{F}_2(t)$： $\frac{1}{2}$ 

四阶近似：$m = 2$，

$\boldsymbol{F}_1(t)$： 

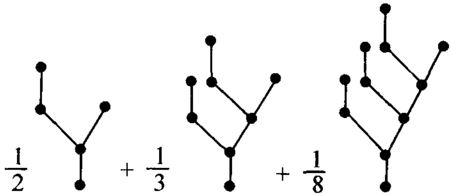
$\boldsymbol{F}_2(t)$： $\frac{1}{2}$  $+\frac{1}{3}$ 

五阶近似：$m = 2$，

$\boldsymbol{F}_1(t)$：



$\boldsymbol{F}_2(t)$：

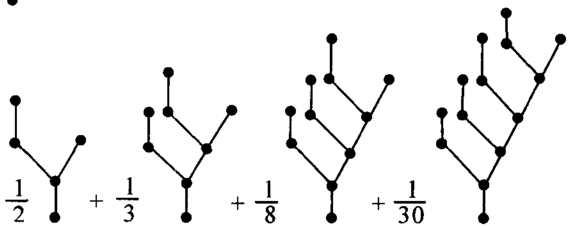


六阶近似：$m = 2$，

$\boldsymbol{F}_1(t)$：



$\boldsymbol{F}_2(t)$：

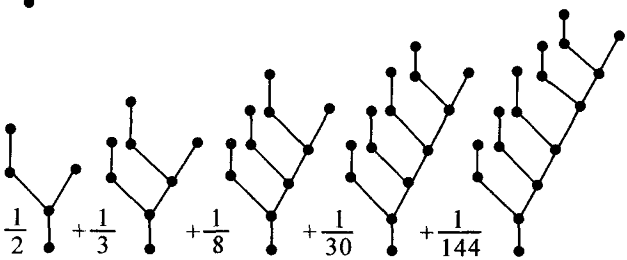


七阶近似：$m = 3$，

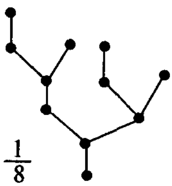
$\boldsymbol{F}_1(t)$：



$\boldsymbol{F}_2(t)$：



$\boldsymbol{F}_3(t)$：



等等。

选取适当的数值计算方法近似其中的多元积分即可得到实用的积分格式。

6.7 本章小结

本章介绍了李群上微分方程的保结构算法的理论，其主要思想是把李群上的微分方程转换为等价的李代数上的微分方程，在李代数上进行求解，而后把所得数值解拉回到原李群。另外，还讨论了矩阵李群上的微分方程的李群积分方法，其中 Crouch-Grossman 方法和 RKMK 方法很相似，前者需要计算更多的指数矩阵，而后者需要一定数量的矩阵交换子的运算，但是，基于任何一个 Runge-Kutta 方法都可以构造一个 RKMK 方法，而构造高阶的 Crouch-Grossman 方法非常困难。最后，较为详细地介绍了 Magnus 级数方法和 Fer 展开方法，根据 Magnus 和 Fer 展开式，可以构造任意精度要求的李群积分方法。

参考文献

1 Munthe-Kaas H. Lie - Butcher theory for Runge-Kutta methods. BIT. 1995, 35: 572 ～ 587

2 Munthe-Kaas H. Runge-Kutta methods on Lie group. BIT. 1998, 38(1): 92 ～ 111

3 Owren B, Welfert B. The Newton iteration on Lie groups. Technical Report Numerics No. 3/1996, Norwegian University of Science and Technology. Trondheim, Norway, 1996

4 Varadarajan V S. Lie groups, Lie algebras, and their representations. GTM 102, Springer, 1984

5 Munthe-Kaas H. High order Runge-Kutta methods on manifolds. Applied Numerical Mathematics, 1999, 29(1): 115 ～ 127

6 Hairer E. Geometric integration of ordinary differential equations on manifolds. BIT. 2001, 41: 996 ~ 1007

7 Crouch P E, Grossman R. Numerical integration of ordinary differential equations on manifolds. J. Nonlinear Sci.. 1993, 3: 1 ~ 33

8 Hairer E, Lubich C, Wanner G. Geometric numerical integration. Springer-Verlag Berlin, 2002

9 Owren B, Marthinsen A. Integration methods based on canonical coordinates of the second kind. Numer. Math. 2001, 87: 763 ~ 790

10 Celledoni E, Iserles A. Methods for the approximation of the matrix exponential in a Lie-algebraic setting. IMA J. Numer. Anal. 2001, 21: 463 ~ 488

11 Iserles A, Nφrsett S P. On the solution of linear differential equations in Lie groups. Phil. Trans. R. Soc., Lond. 1999, 357: 983 ~ 1019

12 Iserles A, Munthe-Kaas H, Nφrsett S P, Zanna A. Lie-group methods. Acta Numerica. 2000. 215 ~ 365

第七章　一般非线性动力学方程的几何积分方法

7.1 引　言

继 Ruth[1],Candy 和 Rozmus[2],Suzuki[3] 和 Yoshida[15] 等的开创性工作之后,李群方法等几何积分方法已广泛地应用于天体力学[4]、量子力学[5~6]、等离子模拟技术[7] 等领域,更多地用于守恒动力系统[8]、天体动力学[4]、电动力学[9]、分子动力学[10~11]、弹性力学和流体力学[12] 等领域的 Hamilton 系统问题的求解。在非线性动力学领域,最广泛的方程形式为

$$\dot{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x},t),\quad \boldsymbol{x}(t_0) = \boldsymbol{x}_0 \tag{7.1}$$

它覆盖了几乎所有的应用领域,如刚体及柔体的多体动力学、结构力学、生物力学及实时飞行器模拟等。第三章讨论了广义 Hamilton 系统及广义 Hamilton 控制系统的几何积分方法,虽然其理论具有一般性,但它多数是针对广义的 Hamilton 系统,或经由 Lagrange 型方程转化成的广义 Hamilton(控制)系统。一般多体系统动力学的 Hamilton 正则方程的建立,涉及动力学中的 Lagrange 逆问题,目前还没有很好地解决。因此,研究更一般形式的非线性动力学方程的几何积分方法是非常必要的。

另外,一般的动力学方程式(7.1)中,$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x},t)$ 显含时间的部分,在许多问题中具有很重要的作用。因此,构造数值方法除了保持真解的定性性质之外,有必要特别处理显含时间的组成部分。最简单且常用的技巧是增加相空间的维数,把时间变量 t 看做一个

新的坐标变量。那么，原微分方程变换为

$$\dot{\boldsymbol{y}} = \boldsymbol{F}(\boldsymbol{y}) \tag{7.2}$$

式中，$\boldsymbol{y} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{x} \\ t \end{bmatrix}$，$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{y}) = \begin{bmatrix} \boldsymbol{f}(\boldsymbol{y}) \\ 1 \end{bmatrix}$。然而，在许多情况下，这种变换并不是很有效，例如下面的几种情况：

(1) 如果显含时间的 $\boldsymbol{f}$ 有瞬时时标(short time scale)，如上显式地处理时间变量后，就必须应用特别的积分公式甚至必须要精确积分。

(2) 如果 $\boldsymbol{f}$ 中显含时间的函数较复杂，因为不可能最小化时间的计数，那么求解变换后的微分方程式(7.2) 的方法一般也是计算量很大。

(3) 如同第三章的广义 Hamilton 系统，当式(7.1) 中的 $\boldsymbol{f}$ 中不显含时间变量或具有某种代数结构时，有许多数值方法特别有效。虽然变换后所得的微分方程式(7.2) 的时间依赖性不见了，但是，原来系统的代数结构可能被破坏了，人们只好寻求更一般的数值方法。

为了避免这些问题，第三章讨论的广义 Hamilton 系统的保结构算法，对于非自治系统，基于 Magnus 和 Fer 展开式的思想和方法推导出不同的李群积分法。但是，第三章主要强调思想方法和理论推导，其算法的具体实施并不简单。本章期望把已有的数值方法进一步推广到一般非线性动力学系统领域，同时，尽量简化计算、减少计算量以使设计的算法更加实用、有效。

Magnus 和 Fer 展开方法不仅能保持精确解的代数结构，而且它特别处理了系统依赖时间变量的部分。经典的 Magnus 和 Fer 展开方法一般用于研究如下线性矩阵微分方程的求解问题：

$$\dot{\boldsymbol{U}} = \boldsymbol{A}(t)\boldsymbol{U}, \quad \boldsymbol{U}(t_0) = \boldsymbol{I} \tag{7.3}$$

式中，$\boldsymbol{A}(t)$ 表示足够光滑的矩阵或线性算子。式(7.3) 的解可以局部地表示为如下的形式[24]：

$$\boldsymbol{U}(t,t_0) = \mathrm{e}^{\boldsymbol{\Omega}(t,t_0)} \tag{7.4}$$

式中，$\boldsymbol{\Omega}$ 是如下的无穷级数：

$$\boldsymbol{\Omega}(t,t_0) = \sum_{k=1}^{\infty} \boldsymbol{\Omega}_k(t,t_0) \tag{7.5}$$

方程式(7.4) 和式(7.5) 构成了微分方程式(7.3) 的解的 Magnus 展开式。级数式(7.5) 中的每一项 $\boldsymbol{\Omega}_k$ 都是多重交换子的多元积分，它们可以迭代生成[24~26]。

与之相似的 Fer 展开式[27]，它以无穷个指数乘积的形式给出了 $\boldsymbol{U}(t,t_0)$ 的一个解，即

$$\boldsymbol{U}(t,t_0) = \prod_{k=1}^{\infty} \mathrm{e}^{\boldsymbol{F}_k(t)} = \mathrm{e}^{\boldsymbol{F}_1(t)} \mathrm{e}^{\boldsymbol{F}_2(t)} \cdots \tag{7.6}$$

式中，$\boldsymbol{F}_k$ 也可以迭代构造。

根据常微分方程理论，如果 $\boldsymbol{A}(t)$ 是一个 $n \times n$ 的光滑的（复）函数矩阵或线性算子，那么，矩阵微分方程式(7.3) 与如下线性齐次方程密切相关：

$$\dot{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{A}(t)\boldsymbol{x}, \quad \boldsymbol{x}(t_0) = \boldsymbol{x}_0 \tag{7.7}$$

式中，$\boldsymbol{x} \in \boldsymbol{C}^n$，也就是说，如果 $\boldsymbol{U}(t,t_0)$ 满足式(7.3)，则

$$\boldsymbol{x}(t) = \boldsymbol{U}(t,t_0)\boldsymbol{x}_0 \tag{7.8}$$

该式即为式(7.7) 的解。

Magnus 和 Fer 展开式已经非常有效地用于数值求解线性矩阵微分方程[18,19,23,28~33]，甚至用于求解李群或齐性空间上的非线性微分方程[29,32,34]、Hamilton 系统的微分方程[20~22]。其优点在于，即使适当截断，它依然保持精确解的几何性质。文献[13] 给出了相应算法的收敛性条件，并进行了误差分析。本章旨在将 Magnus 和 Fer 展开式的思想和方法用于求解一般的非线性动力学方程。事实上，对于非线性的动力学方程式(7.1)，在一个步长范围内，Magnus 及 Fer 展开近似方法可以看成是一种平均方法，例如，将式(7.1) 平均化，可得

$$\frac{\mathrm{d}\bar{\boldsymbol{x}}}{\mathrm{d}t} = \bar{\boldsymbol{f}}(\bar{\boldsymbol{x}}),\ \bar{\boldsymbol{x}}(t_0) = \boldsymbol{x}(t_0)$$

式中，$\bar{\boldsymbol{f}}(\bar{\boldsymbol{x}}) = \frac{1}{h}\int_{t_0}^{t_0+h} \boldsymbol{f}(\bar{\boldsymbol{x}}, s)\mathrm{d}s$，它的解是式(7.1)的二阶的近似解 $\bar{\boldsymbol{x}}(h) = \boldsymbol{x}(h) + O(h^3)$，从后面的讨论可知，它对应于截取了 Magnus 级数或 Fer 展开的第一项所得的近似解。

另一方面，文献[16,17]把非线性动力学系统转化为 Minkowski 空间 M^{n+1} 上的一个增广动力系统，表示为一个李型方程，而且呈现出了原非线性系统内在的对称群性质。采用增广动力系统形式的一个最大优点是可以在增广的空间形式采用齐性坐标非常方便地构造李群积分方法，从而避免传统数值方法计算中可能出现的伪解和鬼点等问题。

如第三章所讨论的方法一样，基于 Magnus 和 Fer 展开式的数值方法都涉及了大量的交换子和多元积分的计算，这限制了这类方法的应用。文献[34]给出了用一元积分近似 $\boldsymbol{\Omega}_k$ 的方法，文献[35]及[31,34]分别应用了自由李代数的相关理论和时间对称性研究减少交换子计算量的方法。这些工作大大地发展了级数方法的研究，也将有利于减少数值计算的工作量。

基于上述考虑，本章还运用了李级数展开的技巧和 Magnus 级数的对称性，把 Magnus 和 Fer 展开式的思想和方法非常有效地用于构造一般非线性动力学方程式(7.1)的数值方法。其主要从两个不同的角度，基于 Magnus 和 Fer 展开式深入而系统地研究了一般非线性动力学方程的李群积分法：一个是在算子理论范围，把非线性动力学方程表示为一种线性映射作用的模型，便于在线性方程理论上设计新算法；另一个是把动力学系统的构形空间拓广到 Minkowski 空间，在 Minkowski 空间，非线性动力学方程变形为增广的动力学系统，从而动力学方程可以化为一个李型方程，便于算法设计和程序实现。

7.2 一般非线性动力学系统的增广动力学系统形式及其锥结构

7.2.1 动力学系统的增广动力学系统形式

这里，在 Minkowski 空间 M^{n+1} 的框架下考虑非线性动力学系统式(7.1)。对任意矢量 $\boldsymbol{x}\neq 0$，定义

$$\boldsymbol{n}:=\boldsymbol{x}/\|\boldsymbol{x}\| \tag{7.9}$$

式中，$\|\boldsymbol{x}\|=\sqrt{\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{x}}$ 是 $\boldsymbol{x}$ 的欧几里得范数，矢量间的点，即 $\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{y}$，表示其内积运算。由式(7.1) 和式(7.9) 可得

$$\dot{\boldsymbol{n}}=\frac{\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})}{\|\boldsymbol{x}\|}-\left(\frac{\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})}{\|\boldsymbol{x}\|}\cdot\boldsymbol{n}\right)\boldsymbol{n} \tag{7.10}$$

记

$$X^0(t)=\|\boldsymbol{x}(t_i)\|\exp\left[\int_{t_i}^{t}\left(\frac{\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}(\xi),\xi)}{\|\boldsymbol{x}(\xi)\|}\cdot\boldsymbol{n}(\xi)\right)\mathrm{d}\xi\right] \tag{7.11}$$

式中，$\boldsymbol{x}(t_i)$ 是 $\boldsymbol{x}$ 在初始时刻 t_i 的初始值。假设 $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x},t)\cdot\boldsymbol{x}\neq 0$，那么，式(7.10) 及式(7.11) 即成为

$$\dot{\boldsymbol{X}}=\boldsymbol{A}\boldsymbol{X} \tag{7.12}$$

式中，表示增广的状态变量的齐次坐标为

$$\boldsymbol{X}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{X}^s\\ X^0\end{bmatrix}:=\begin{bmatrix}X^0\boldsymbol{n}\\ X^0\end{bmatrix} \tag{7.13}$$

而

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{0}_{n\times n} & \dfrac{\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x},t)}{\|\boldsymbol{x}\|}\\ \dfrac{\boldsymbol{f}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x},t)}{\|\boldsymbol{x}\|} & 0\end{bmatrix} \tag{7.14}$$

是洛伦兹群 $SO_0(n,1)$ 的(局部) 李代数，满足

$$\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g}+\boldsymbol{g}\boldsymbol{A}=0 \tag{7.15}$$

式中，$\boldsymbol{g}$ 是 Minkowski 度量矩阵，即

$$\boldsymbol{g}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{I}_n & \boldsymbol{0}_{n\times 1}\\ \boldsymbol{0}_{1\times n} & -1\end{bmatrix} \tag{7.16}$$

$\boldsymbol{I}_n$ 是 n 阶单位矩阵。

由

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\|\boldsymbol{x}\|=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\sqrt{\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{x}}=\dot{\boldsymbol{x}}\cdot\boldsymbol{n}=\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x},t)\cdot\boldsymbol{n}=\|\boldsymbol{x}\|\frac{\dot{X}^0}{X^0}$$

不难得到

$$\frac{\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\|\boldsymbol{x}\|}{\|\boldsymbol{x}\|}=\frac{\dot{X}^0}{X^0} \tag{7.17}$$

对式(7.17)两边分别积分，并根据式(7.11)我们知道，$X^0(t_i)=\|\boldsymbol{x}(t_i)\|$，因此

$$X^0=\|\boldsymbol{x}\| \tag{7.18}$$

于是，增广的状态变量就是

$$\boldsymbol{X}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{X}^s\\ X^0\end{bmatrix}:=\begin{bmatrix}X^0\boldsymbol{n}\\ X^0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}\\ \|\boldsymbol{x}\|\end{bmatrix} \tag{7.19}$$

则系统式(7.12)就变为

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}\\ \|\boldsymbol{x}\|\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{0}_{n\times n} & \dfrac{\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x},t)}{\|\boldsymbol{x}\|}\\ \dfrac{\boldsymbol{f}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x},t)}{\|\boldsymbol{x}\|} & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}\\ \|\boldsymbol{x}\|\end{bmatrix} \tag{7.20}$$

显然，式(7.20)的第一个方程就是原动力学方程式(7.1)，引入第二个方程就给出了增广非线性系统的 Minkowski 结构。特别地，这样就把原来 $\boldsymbol{R}^n$ 上 n 维的动力学系统式(7.1)自然地嵌入到 Minkowski 空间上的$(n+1)$维的动力学系统式(7.12)(或式(7.20))。尽管新的系统的维数增加了，后面可以看出该系统在保群算法的设计方面具有很大的优越性。

由上述不难发现：

$$\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g}\boldsymbol{X}=\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{x}-\|\boldsymbol{x}\|^2=0 \tag{7.21}$$

该式是增广动力系统在 Minkowski 空间上自然成立的一个零锥结构，为此，该锥结构是动力系统式(7.12)(或式(7.20)) 应当满足的一个约束。

7.2.2 洛仑兹群及其李代数的性质

由式(7.14) 及式(7.16)，不难验证 $\boldsymbol{A}$ 满足如下性质：

$$\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g}+\boldsymbol{g}\boldsymbol{A}=\boldsymbol{0} \quad 或 \quad \boldsymbol{A}\boldsymbol{g}+\boldsymbol{g}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{0} \tag{7.22}$$

用 $\boldsymbol{g}$ 乘式(7.22) 第一个方程的两侧，并利用等式 $\boldsymbol{g}^2=\boldsymbol{I}_{n+1}$，可得第二个方程。该方程表明矩阵 $\boldsymbol{A}$(或 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$) 属于洛仑兹群 $SO_0(n,1)$ 的李代数，而群 $SO_0(n,1)$ 中的任意元素 $\boldsymbol{G}$ 满足如下性质：

$$\boldsymbol{G}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g}\boldsymbol{G}=\boldsymbol{g} \quad 或 \quad \boldsymbol{G}\boldsymbol{g}\boldsymbol{G}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{g} \tag{7.23}$$

$$\det\boldsymbol{G}=1 \tag{7.24}$$

利用等式 $\boldsymbol{g}^2=\boldsymbol{I}_{n+1}$ 和等式 $\boldsymbol{g}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{g}$，不难由式(7.23) 的第一个方程得到第二个方程。用 $\boldsymbol{g}$ 左乘式(7.23)，即

$$(\boldsymbol{G}\boldsymbol{g})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g}\boldsymbol{G}=\boldsymbol{I}_{n+1} \tag{7.25}$$

这说明$(\boldsymbol{G}\boldsymbol{g})^{\mathrm{T}}$ 是 $\boldsymbol{g}\boldsymbol{G}$ 的逆，因此

$$\boldsymbol{g}\boldsymbol{G}(\boldsymbol{G}\boldsymbol{g})^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{I}_{n+1} \tag{7.26}$$

依然成立。如果用 $\boldsymbol{g}$ 左乘式(7.26)，并利用 $\boldsymbol{g}^2=\boldsymbol{I}_{n+1}$ 和 $\boldsymbol{g}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{g}$，又可以得到

$$\boldsymbol{G}\boldsymbol{g}\boldsymbol{G}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{g}$$

关于李代数 $\boldsymbol{A}\in so(n,1)$ 及其李群 $\boldsymbol{G}\in SO_0(n,1)$，其中 n 是一正整数，表示系统的维数。那么，还不难证明它们的如下性质：

如果 $\boldsymbol{G}\in SO_0(n,1)$，那么 $\quad \boldsymbol{G}^{-1}=\boldsymbol{g}\,\boldsymbol{G}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g} \quad$ (7.27)

当且仅当 $\boldsymbol{M}\boldsymbol{g}\boldsymbol{M}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{N}\boldsymbol{g}\boldsymbol{N}^{\mathrm{T}}$，有 $\quad \boldsymbol{M}^{-1}\boldsymbol{N}\in SO_0(n,1) \quad$ (7.28)

如果 $\boldsymbol{A}\in so(n,1)$，那么 $\quad \exp(t\boldsymbol{A})\in SO_0(n,1) \quad$ (7.29)

如果 $\boldsymbol{A}\in so(n,1)$，而且 $\det(\boldsymbol{I}_{n+1}+\boldsymbol{A})\neq 0$，那么

$$\mathrm{Cay}(\boldsymbol{A}):=(\boldsymbol{I}_{n+1}-\boldsymbol{A})^{-1}(\boldsymbol{I}_{n+1}+\boldsymbol{A})\in SO_0(n,1) \tag{7.30}$$

如果 $\boldsymbol{A} \in so(n,1)$，那么 $$(\boldsymbol{A}^{2m})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g} = \boldsymbol{g}\boldsymbol{A}^{2m} \tag{7.31}$$

如果 $\boldsymbol{A} \in so(n,1)$，那么 $$(\boldsymbol{A}^{2m+1})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g} = -\boldsymbol{g}\boldsymbol{A}^{2m+1} \tag{7.32}$$

如果 $f_e(x)$ 是一偶次多项式，并且 $\boldsymbol{A} \in so(n,1)$，那么

$$f_e(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})\boldsymbol{g} = \boldsymbol{g}f_e(\boldsymbol{A}) \tag{7.33}$$

如果 $f_o(x)$ 是一奇次多项式，并且 $\boldsymbol{A} \in so(n,1)$，那么

$$f_o(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})\boldsymbol{g} = -\boldsymbol{g}f_o(\boldsymbol{A}) \tag{7.34}$$

如果 $\boldsymbol{A} \in so(n,1)$ 而 $\boldsymbol{G} \in SO_0(n,1)$，那么

$$\boldsymbol{G}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{G} := \boldsymbol{A}' \in so(n,1) \tag{7.35}$$

因为 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$ 也是 $so(n,1)$ 的元素，所以上述关于 $\boldsymbol{A}$ 的性质对 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$ 同样适用。

7.3　基于 Cayley 变换构造保群格式

如前面所述，求解增广动力系统式(7.12)(或式(7.20))的数值方法应严格满足增广系统的锥结构式(7.21)，因此，保持锥结构条件成为选择数值方法的一个最重要的因素。

首先，考虑系统式(7.12)的中心差分格式，即

$$\boldsymbol{X}(t_{k+1}) = \boldsymbol{X}(t_k) + \tau\boldsymbol{A}(\boldsymbol{X}(t_k),t_k)[\boldsymbol{X}(t_{k+1}) + \boldsymbol{X}(t_k)] \tag{7.36}$$

式中，τ 表示积分步长的一半，也就是说 $\tau = \frac{h}{2} = \frac{t_{k+1} - t_k}{2}$。上述结果又称为 $\boldsymbol{X}(t_k)$ 和 $\boldsymbol{X}(t_{k+1})$ 的 Cayley 变换，即

$$\begin{aligned}\boldsymbol{X}(t_{k+1}) = \boldsymbol{G}(t_k)\boldsymbol{X}(t_k) :=& \\ &[\boldsymbol{I}_{n+1} - \tau\boldsymbol{A}(t_k)]^{-1}[\boldsymbol{I}_{n+1} + \tau\boldsymbol{A}(t_k)]\boldsymbol{X}(t_k)\end{aligned} \tag{7.37}$$

由于 Cayley 变换是由李代数 $so(n,1)$ 到它对应的李群 $SO_0(n,1)$ 的一个映射，故当 $\tau < \|\boldsymbol{x}\| / \|\boldsymbol{f}\|$ 时，上式的 $\boldsymbol{G}(t_k)$ 满足 $\boldsymbol{G}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g}\,\boldsymbol{G} = \boldsymbol{g}$，$\det\boldsymbol{G} = 1$。

将式(7.14)代入式(7.37)，有

$$\boldsymbol{G}(t_k)=\begin{bmatrix}\boldsymbol{I}_n+\dfrac{2\tau^2\boldsymbol{f}(t_k)\boldsymbol{f}^{\mathrm{T}}(t_k)}{\|\boldsymbol{x}(t_k)\|^2-\tau^2\|\boldsymbol{f}(t_k)\|^2} & \dfrac{2\tau\|\boldsymbol{x}(t_k)\|\ \|\boldsymbol{f}(t_k)\|}{\|\boldsymbol{x}(t_k)\|^2-\tau^2\|\boldsymbol{f}(t_k)\|^2}\\ \dfrac{2\tau\|\boldsymbol{x}(t_k)\|\ \|\boldsymbol{f}^{\mathrm{T}}(t_k)\|}{\|\boldsymbol{x}(t_k)\|^2-\tau^2\|\boldsymbol{f}(t_k)\|^2} & \dfrac{\|\boldsymbol{x}(t_k)\|^2+\tau^2\|\boldsymbol{f}(t_k)\|}{\|\boldsymbol{x}(t_k)\|^2-\tau^2\|\boldsymbol{f}(t_k)\|^2}\end{bmatrix}\tag{7.38}$$

式中，用了 $\boldsymbol{f}(t_k)$ 来简记 $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}(t_k),t_k)$。对于 $\boldsymbol{x}$ 及 $\|\boldsymbol{x}\|$，它们的离散映射分别为

$$\begin{aligned}\boldsymbol{x}(t_{k+1})&=\boldsymbol{x}(t_k)+\frac{2\tau^2\boldsymbol{f}(t_k)\cdot\boldsymbol{x}(t_k)+2\tau\|\boldsymbol{x}(t_k)\|^2}{\|\boldsymbol{x}(t_k)\|^2-\tau^2\|\boldsymbol{f}(t_k)\|^2}\boldsymbol{f}(t_k)\\ \|\boldsymbol{x}(t_{k+1})\|&=\frac{2\tau\boldsymbol{f}(t_k)\cdot\boldsymbol{x}(t_k)\|\boldsymbol{x}(t_k)\|}{\|\boldsymbol{x}(t_k)\|^2-\tau^2\|\boldsymbol{f}(t_k)\|^2}+\\ &\qquad\frac{\|\boldsymbol{x}(t_k)\|(\|\boldsymbol{x}(t_k)\|^2+\tau^2\|\boldsymbol{f}(t_k)\|)}{\|\boldsymbol{x}(t_k)\|^2-\tau^2\|\boldsymbol{f}(t_k)\|^2}\end{aligned}\tag{7.39}$$

利用上面两个等式，不难验证

$$\begin{aligned}&\boldsymbol{x}(t_{k+1})\cdot\boldsymbol{x}(t_{k+1})-\|\boldsymbol{x}(t_{k+1})\|^2=\\ &\qquad\boldsymbol{x}(t_k)\cdot\boldsymbol{x}(t_k)-\|\boldsymbol{x}(t_k)\|^2=0\end{aligned}\tag{7.40}$$

因此，每一步都能满足锥结构条件。事实上，上述数值积分过程，只需要式(7.39)与欧拉积分格式 $\boldsymbol{x}(t_{k+1})=\boldsymbol{x}(t_k)+2\tau\boldsymbol{f}(t_k)$ 相比，格式式(7.39)可以看做是一种可调步长的积分格式，即

$$\boldsymbol{x}(t_{k+1})=\boldsymbol{x}(t_k)+\eta(t_k)\boldsymbol{f}(t_k)\tag{7.41}$$

式中

$$\eta(t_k)=2\tau\frac{\tau\boldsymbol{f}(t_k)\cdot\boldsymbol{x}(t_k)+\|\boldsymbol{x}(t_k)\|^2}{\|\boldsymbol{x}(t_k)\|^2-\tau^2\|\boldsymbol{f}(t_k)\|^2}>0\tag{7.42}$$

而且，$\tau<\|\boldsymbol{x}\|/\|\boldsymbol{f}\|$，它是动力学系统式(7.1)的 Lipschitz 条件所要求。积分格式式(7.39)能保持原动力学系统的不动点及其他性质。事实上，有

$$\boldsymbol{x}(t_{k+1})=\boldsymbol{x}(t_k)\Rightarrow\boldsymbol{f}(t_k)=0\tag{7.43}$$

这意味着当且仅当 $\boldsymbol{x}$ 是原系统式(7.1)的平衡点时，$\boldsymbol{x}(t_k)$ 是离散

系统式(7.39)的一个不动点。

下面讨论不动点的性质，映射式(7.39)的 Jacobi 矩阵为

$$\boldsymbol{J}:=\frac{\partial \boldsymbol{x}(t_{k+1})}{\partial \boldsymbol{x}(t_k)}=\boldsymbol{I}_n+\boldsymbol{f}(t_k)\left(\frac{\partial \eta(t_k)}{\partial \boldsymbol{x}(t_k)}\right)^{\mathrm{T}}+\eta(t_k)\frac{\partial \boldsymbol{f}(t_k)}{\partial \boldsymbol{x}(t_k)} \tag{7.44}$$

在不动点处，有 $\boldsymbol{f}(t_k)=0$，因此

$$\boldsymbol{J}=\frac{\partial \boldsymbol{x}(t_{k+1})}{\partial \boldsymbol{x}(t_k)}=\boldsymbol{I}_n+\eta(t_k)\frac{\partial \boldsymbol{f}(t_k)}{\partial \boldsymbol{x}(t_k)} \tag{7.45}$$

因为 $\eta(t_k)>0$，不动点的性质不会由于离散映射式(7.39)而破坏，更精确地说，映射式(7.39)与原动力学系统具有同样的稳定性质。

7.4　基于 Pade 逼近构造保群格式

7.3 节讲述的基于 Cayley 变换的积分格式只能达到二阶精度，本节采用指数函数的 Pade 逼近来构造高精度的数值方法。一般地，用两个多项式的比值来近似求得指数函数 $\exp(x)$，即

$$\exp(x)\approx p_{lm}(x):=n_{lm}(x)/d_{lm}(x) \tag{7.46}$$

式中

$$n_{lm}(x):=\sum_{k=0}^{m}\frac{(l+m-k)!m!}{(l+m)!(m-k)!k!}x^k \tag{7.47}$$

$$d_{lm}(x):=\sum_{k=0}^{m}\frac{(l+m-k)!l!}{(l+m)!(l-k)!k!}(-x)^k \tag{7.48}$$

与指数函数 $\exp(x)$ 的 Taylor 级数展开进行比较，不难发现如上所得的 $p_{lm}(x)$ 是它的一个 $l+m$ 阶逼近，并称其为 $l+m$ 阶 Pade 逼近。其中 $l=m$ 时的特殊情形称为对角 Pade 逼近。下面利用 $p_{ll}(\tau\boldsymbol{A})$ 来近似计算 $\exp(\tau\boldsymbol{A})$。

命题 7.1　设 $\boldsymbol{A}\in so(n,1)$，那么，对于足够小的 τ，$p_{ll}(\tau\boldsymbol{A})\in SO_0(n,1)$。

证明 当 $l=m$ 时，函数 $n_{ll}(x)$ 和 $d_{ll}(x)$ 分别可以分解为

$$n_{ll}(x)=f_e(x)+f_o(x),\quad d_{ll}(x)=f_e(x)-f_o(x)$$

其中，$f_e(x)$ 是一偶次多项式，而 $f_o(x)$ 是一奇次多项式。

首先证明：

$$[f_e(\tau\boldsymbol{A})-f_o(\tau\boldsymbol{A})]^{-1}[f_e(\tau\boldsymbol{A})+f_o(\tau\boldsymbol{A})]\in SO(n,1)$$

也就是要证

$$[f_e(\tau\boldsymbol{A})-f_o(\tau\boldsymbol{A})]^{-1}[f_e(\tau\boldsymbol{A})+f_o(\tau\boldsymbol{A})]$$
$$\boldsymbol{g}[f_e(\tau\boldsymbol{A})+f_o(\tau\boldsymbol{A})]^{\mathrm{T}}[f_e(\tau\boldsymbol{A})-f_o(\tau\boldsymbol{A})]^{-\mathrm{T}}=\boldsymbol{g}$$

上式等价于

$$[f_e(\tau\boldsymbol{A})+f_o(\tau\boldsymbol{A})]\boldsymbol{g}[f_e(\tau\boldsymbol{A})+f_o(\tau\boldsymbol{A})]^{\mathrm{T}}=$$
$$[f_e(\tau\boldsymbol{A})-f_o(\tau\boldsymbol{A})]\boldsymbol{g}[f_e(\tau\boldsymbol{A})-f_o(\tau\boldsymbol{A})]^{\mathrm{T}}$$

展开上式，并在两边抵消了 $f_e(\tau\boldsymbol{A})\boldsymbol{g}f_e(\tau\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})$ 和 $f_o(\tau\boldsymbol{A})\boldsymbol{g}f_o(\tau\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})$，即是

$$f_e(\tau\boldsymbol{A})\boldsymbol{g}f_o(\tau\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})+f_o(\tau\boldsymbol{A})\boldsymbol{g}f_e(\tau\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})=$$
$$-f_e(\tau\boldsymbol{A})\boldsymbol{g}f_o(\tau\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})-f_o(\tau\boldsymbol{A})\boldsymbol{g}f_e(\tau\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})$$

进一步可约化为如下形式：

$$f_e(\tau\boldsymbol{A})\boldsymbol{g}f_o(\tau\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})=-f_o(\tau\boldsymbol{A})\boldsymbol{g}f_e(\tau\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})\tag{7.49}$$

由式(7.33)可知

$$f_e(\tau\boldsymbol{A})\boldsymbol{g}f_o(\tau\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})=\boldsymbol{g}f_e(\tau\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})f_o(\tau\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})$$

同理，由式(7.34)可得

$$-f_o(\tau\boldsymbol{A})\boldsymbol{g}f_e(\tau\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})=\boldsymbol{g}f_o(\tau\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})f_e(\tau\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})$$

因为 $f_e(\tau\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})f_o(\tau\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})=f_o(\tau\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})f_e(\tau\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})$，因此式(7.49)成立。

为此，可以构造一系列保持群结构的数值格式。上一节的积分格式实际上就是这里的 $p_{11}(\tau\boldsymbol{A})$ 型格式。根据其他对角 Pade 逼近公式，有 $p_{22}(\tau\boldsymbol{A})$ 型格式为

$$\boldsymbol{X}(t_{k+1})=\boldsymbol{G}(t_k)\boldsymbol{X}(t_k):=$$
$$\left[\boldsymbol{I}_{n+1}-\tau\boldsymbol{A}(t_k)+\frac{\tau^2}{3}\boldsymbol{A}^2(t_k)\right]^{-1}\times$$

$$\left[\boldsymbol{I}_{n+1}+\tau\boldsymbol{A}(t_k)+\frac{\tau^2}{3}\boldsymbol{A}^2(t_k)\right]\boldsymbol{X}(t_k) \tag{7.50}$$

及 $p_{33}(\tau\boldsymbol{A})$ 型格式为

$$\begin{aligned}\boldsymbol{X}(t_{k+1}) &= \boldsymbol{G}(t_k)\boldsymbol{X}(t_k):= \\ &\left[\boldsymbol{I}_{n+1}-\tau\boldsymbol{A}(t_k)+\frac{2\tau^2}{5}\boldsymbol{A}^2(t_k)-\frac{\tau^3}{15}\boldsymbol{A}^3(t_k)\right]^{-1}\times \\ &\left[\boldsymbol{I}_{n+1}+\tau\boldsymbol{A}(t_k)+\frac{2\tau^2}{5}\boldsymbol{A}^2(t_k)+\frac{\tau^3}{15}\boldsymbol{A}^3(t_k)\right]\boldsymbol{X}(t_k)\end{aligned} \tag{7.51}$$

如此构造的 $p_{ll}(\tau\boldsymbol{A})$ 型数值积分具有 $2l$ 阶精度。关于 $\boldsymbol{A}$ 的方幂有如下形式：

$$\boldsymbol{A}^k=\frac{1}{\|\boldsymbol{x}\|^k}\begin{bmatrix}\boldsymbol{0}_{n\times n} & \|\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x},t)\|^{k-1}\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x},t)\\ \|\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x},t)\|^{k-1}\boldsymbol{f}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x},t) & 0\end{bmatrix},\quad k\text{ 是正奇数} \tag{7.52}$$

$$\boldsymbol{A}^k=\frac{1}{\|\boldsymbol{x}\|^k}\begin{bmatrix}\|\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x},t)\|^{k-2}\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x},t)\boldsymbol{f}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x},t) & \boldsymbol{0}_{n\times 1}\\ \boldsymbol{0}_{1\times n} & \|\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x},t)\|^{k}\end{bmatrix},\quad k\text{ 是正偶数} \tag{7.53}$$

可以利用上述方幂形式和 Pade 逼近公式来构造高阶数值格式。把式(7.14)中的 $\boldsymbol{A}$ 代入式(7.52)和式(7.53)，然后再代入式(7.50)和式(7.51)，即可得到显式的保群格式，具体可以表示为

$$\boldsymbol{G}(t_k)=\begin{bmatrix}\boldsymbol{I}_n+\dfrac{2a^2\boldsymbol{f}(t_k)\boldsymbol{f}^{\mathrm{T}}(t_k)}{c} & a\,\dfrac{1+c+\|\boldsymbol{f}(t_k)\|^2(a^2+2b+b^2\|\boldsymbol{f}(t_k)\|^2)}{c(1+b\|\boldsymbol{f}(t_k)\|^2)}\boldsymbol{f}(t_k)\\ a\,\dfrac{1+c+\|\boldsymbol{f}^{\mathrm{T}}(t_k)\|^2(a^2+2b+b^2\|\boldsymbol{f}(t_k)\|^2)}{c(1+b\|\boldsymbol{f}(t_k)\|^2)}\boldsymbol{f}^{\mathrm{T}}(t_k) & \dfrac{(1+b\|\boldsymbol{f}(t_k)\|^2)^2+a^2\|\boldsymbol{f}(t_k)\|^2}{c}\end{bmatrix} \tag{7.54}$$

式中,四阶格式(式(7.50))中的 a 和 b 分别为

$$a := \frac{\tau}{\| \boldsymbol{x}(t_k) \|}, \quad b := \frac{\tau^2}{3 \| \boldsymbol{x}(t_k) \|^2} \tag{7.55}$$

六阶格式(式(7.51))中的 a 和 b 分别为

$$a := \frac{15\tau \| \boldsymbol{x}(t_k) \|^2 + \tau^3 \| \boldsymbol{f}(t_k) \|^2}{15 \| \boldsymbol{x}(t_k) \|^3}, \quad b := \frac{2\tau^2}{5 \| \boldsymbol{x}(t_k) \|^2} \tag{7.56}$$

式中,c 均为

$$c := (1 + b \| \boldsymbol{f}(t_k) \|^2)^2 - a^2 \| \boldsymbol{f}(t_k) \|^2 \tag{7.57}$$

要求 $c > 0$,也就是说四阶格式中有

$$\tau \| \boldsymbol{f}(t_k) \| < \| \boldsymbol{x}(t_k) \| \tag{7.58}$$

六阶格式中有

$$\frac{\| \boldsymbol{x}(t_k) \|}{6} < \tau \| \boldsymbol{f}(t_k) \| < \| \boldsymbol{x}(t_k) \| \tag{7.59}$$

实际计算中,只需要式(7.54)中的第一个等式,即

$$\boldsymbol{x}(t_{k+1}) = \boldsymbol{x}(t_k) + \eta(t_k)\boldsymbol{f}(t_k) \tag{7.60}$$

式中

$$\eta(t_k) := \frac{2a^2 \boldsymbol{f}(t_k) \cdot \boldsymbol{x}(t_k)}{c} + a \| \boldsymbol{x}(t_k) \| \frac{1 + c + \| \boldsymbol{f}(t_k) \|^2 (a^2 + 2b + b^2 \| \boldsymbol{f}(t_k) \|^2)}{c(1 + b \| \boldsymbol{f}(t_k) \|^2)} \tag{7.61}$$

由此可见,系数 $\eta(t_k)$ 决定了离散映射式(7.60)是否与原动力学系统具有相同类型的稳定性质。应用 Schwartz 不等式 $\boldsymbol{f}(t_k) \cdot \boldsymbol{x}(t_k) \geqslant -\| \boldsymbol{f}(t_k) \| \| \boldsymbol{x}(t_k) \|$,并应用 $a > 0$,$c > 0$ 以及 $\| \boldsymbol{x}(t_k) \| > 0$,不难推得

$$\eta(t_k) \geqslant a \| \boldsymbol{x}(t_k) \| [(b \| \boldsymbol{f}(t_k) \|^2 - a \| \boldsymbol{f}(t_k) \| + 1)^2 + c] > 0 \tag{7.62}$$

根据 $\eta(t_k) > 0$ 以及离散映射式(7.60)可知,7.3 节所得结论,在本

节中依然成立，所得近似格式保持原系统的平衡点及稳定性质。

综上所述，增广动力学系统形式具有非常重要的性质，基于增广系统构造的数值方法不仅可以很好地近似原系统而且能保持原系统的内在对称性等性质特征。

7.5 部分旋转矢量场

一个矢量场如果具有 $\boldsymbol{\omega}(\boldsymbol{x},t)\boldsymbol{x}$ 的形式，其中 $\boldsymbol{\omega}(\boldsymbol{x},t)$ 是一个 $n\times n$ 阶反对称矩阵，那么该矢量场称为旋转矢量场。这里把矢量场 $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x},t)$ 分解为两部分，即

$$\dot{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{\omega}(\boldsymbol{x},t)\boldsymbol{x} + \boldsymbol{v}(\boldsymbol{x},t) \tag{7.63}$$

式中，$\boldsymbol{\omega}(\boldsymbol{x},t)\boldsymbol{x}$ 满足 $\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{\omega}(\boldsymbol{x},t)\boldsymbol{x}=0$ 是旋转部分；而 $\boldsymbol{v}(\boldsymbol{x},t)$ 是非旋转部分，$\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{v}(\boldsymbol{x},t)\neq 0$。如果 $\boldsymbol{\omega}(\boldsymbol{x},t)\neq 0$ 而 $\boldsymbol{v}(\boldsymbol{x},t)=0$，称式(7.63)右端的矢量是纯旋转矢量；如果 $\boldsymbol{\omega}(\boldsymbol{x},t)\neq 0$ 且 $\boldsymbol{v}(\boldsymbol{x},t)\neq 0$，则称式(7.63)右端的矢量是部分旋转的。本节考虑 $\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{v}(\boldsymbol{x},t)\neq 0$ 的情形，下一节再考虑 $\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{v}(\boldsymbol{x},t)=0$ 的情形。由

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\|\boldsymbol{x}\| = \frac{\boldsymbol{x}\circ\dot{\boldsymbol{x}}}{\|\boldsymbol{x}\|} = \frac{\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{\omega}\boldsymbol{x}+\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{v}}{\|\boldsymbol{x}\|} = \frac{\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{v}}{\|\boldsymbol{x}\|} \tag{7.64}$$

及式(7.63)可得

$$\dot{\boldsymbol{n}} = \boldsymbol{\omega}\boldsymbol{n} + \frac{\boldsymbol{v}}{\|\boldsymbol{x}\|} - \frac{\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{n}}{\|\boldsymbol{x}\|}\boldsymbol{n} \tag{7.65}$$

同 7.4 节，假设

$$X^0(t) := \|\boldsymbol{x}(t_i)\|\exp\left[\int_{t_i}^{t}\frac{\boldsymbol{v}(\boldsymbol{n}(\xi),\xi)\cdot\boldsymbol{n}(\xi)}{\|\boldsymbol{x}(\xi)\|}\mathrm{d}\xi\right] \tag{7.66}$$

这样式(7.63)和式(7.66)构成了下面的系统：

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}\\ \|\boldsymbol{x}\|\end{bmatrix} = \boldsymbol{A}\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}\\ \|\boldsymbol{x}\|\end{bmatrix} \tag{7.67}$$

式中

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{\omega}(\boldsymbol{x},t) & \dfrac{\boldsymbol{v}(\boldsymbol{x},t)}{\|\boldsymbol{x}\|}\\ \dfrac{\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x},t)}{\|\boldsymbol{x}\|} & 0\end{bmatrix} \tag{7.68}$$

满足方程式(7.15)的实李代数 $so(n,1)$ 的元素 $\boldsymbol{A}$ 都有式(7.68)的一般形式。利用非零、反对称矩阵 $\boldsymbol{\omega}$，可以进一步推广上面的数值格式，当然需要更多的代数计算。首先介绍形如式(7.68)的矩阵的逆运算，即

$$\begin{bmatrix}\boldsymbol{\beta} & \boldsymbol{\alpha}\\ \boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}} & \beta_{00}\end{bmatrix}^{-1}=$$
$$\begin{bmatrix}\boldsymbol{\beta}^{-1}+\dfrac{1}{\beta_{00}-\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\beta}^{-1}\boldsymbol{\alpha}}\boldsymbol{\beta}^{-1}\boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\beta}^{-1} & -\dfrac{1}{\beta_{00}-\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\beta}^{-1}\boldsymbol{\alpha}}\boldsymbol{\beta}^{-1}\boldsymbol{\alpha}\\ -\dfrac{1}{\beta_{00}-\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\beta}^{-1}\boldsymbol{\alpha}}\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\beta}^{-1} & \dfrac{1}{\beta_{00}-\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\beta}^{-1}\boldsymbol{\alpha}}\end{bmatrix} \tag{7.69}$$

式中，$\boldsymbol{\beta}$ 是一个 $n\times n$ 阶非奇异矩阵，$\boldsymbol{\alpha}$ 是一个 $n\times 1$ 行矩阵，而 β_{00} 是一标量，且 $\beta_{00}\neq\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\beta}^{-1}\boldsymbol{\alpha}$，那么，$\boldsymbol{I}_{n+1}-\tau\boldsymbol{A}$ 的逆矩阵为

$$(\boldsymbol{I}_{n+1}-\tau\boldsymbol{A})^{-1}=$$
$$\begin{bmatrix}(\boldsymbol{I}_n-\tau\boldsymbol{\omega})^{-1}+ \\ \dfrac{d\tau^2}{\|\boldsymbol{x}\|^2}(\boldsymbol{I}_n-\tau\boldsymbol{\omega})^{-1}\boldsymbol{v}\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{I}_n-\tau\boldsymbol{\omega})^{-1} & \dfrac{d\tau}{\|\boldsymbol{x}\|}(\boldsymbol{I}_n-\tau\boldsymbol{\omega})^{-1}\boldsymbol{v}\\ \dfrac{d\tau}{\|\boldsymbol{x}\|}\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{I}_n-\tau\boldsymbol{\omega})^{-1} & d\end{bmatrix} \tag{7.70}$$

式中

$$d:=\frac{\|\boldsymbol{x}\|^2}{\|\boldsymbol{x}\|^2-\tau^2\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{I}_n-\tau\boldsymbol{\omega})^{-1}\boldsymbol{v}} \tag{7.71}$$

把式(7.70)，式(7.68)代入式(7.37)即可得二阶近似格式的离散变换矩阵为

$$\boldsymbol{G}(t_k)=[\boldsymbol{I}_{n+1}-\tau\boldsymbol{A}(t_k)]^{-1}[\boldsymbol{I}_{n+1}+\tau\boldsymbol{A}(t_k)]=$$

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{I}_n + \dfrac{2d\tau^3}{\|\boldsymbol{x}\|^2}(\boldsymbol{I}_n - \tau\boldsymbol{\omega})^{-1}\boldsymbol{v}\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{I}_n - \tau\boldsymbol{\omega})^{-1}\boldsymbol{\omega} + \\ 2\tau(\boldsymbol{I}_n - \tau\boldsymbol{\omega})^{-1}\boldsymbol{\omega} + \dfrac{2d\tau^2}{\|\boldsymbol{x}\|^2}(\boldsymbol{I}_n - \tau\boldsymbol{\omega})^{-1}\boldsymbol{v}\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}} & \dfrac{2d\tau^3}{\|\boldsymbol{x}\|^3}(\boldsymbol{I}_n - \tau\boldsymbol{\omega})^{-1}\boldsymbol{v}\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{I}_n - \tau\boldsymbol{\omega})^{-1}\boldsymbol{v} + \dfrac{2\tau}{\|\boldsymbol{x}\|}(\boldsymbol{I}_n - \tau\boldsymbol{\omega})^{-1}\boldsymbol{v} \\ \dfrac{2d\tau^2}{\|\boldsymbol{x}\|}\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{I}_n - \tau\boldsymbol{\omega})^{-1}\boldsymbol{\omega} + \dfrac{2d\tau}{\|\boldsymbol{x}\|}\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}} & 1 + \dfrac{2d\tau^2}{\|\boldsymbol{x}\|^2}\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{I}_n - \tau\boldsymbol{\omega})^{-1}\boldsymbol{v} \end{bmatrix} \tag{7.72}$$

不同阶的矩阵$(\boldsymbol{I}_{n+1} - \tau\boldsymbol{\omega})$的逆可以表示为

$$\text{二维：}(\boldsymbol{I}_2 - \tau\boldsymbol{\omega})^{-1} = \frac{1}{1+\tau^2\det\boldsymbol{\omega}}\boldsymbol{I}_2 + \frac{\tau}{1+\tau^2\det\boldsymbol{\omega}}\boldsymbol{\omega} \tag{7.73}$$

$$\text{三维：}(\boldsymbol{I}_3 - \tau\boldsymbol{\omega})^{-1} = \boldsymbol{I}_3 + \frac{\tau}{1+\tau^2\|\boldsymbol{\omega}\|^2/2}\boldsymbol{\omega} + \frac{\tau^2}{1+\tau^2\|\boldsymbol{\omega}\|^2/2}\boldsymbol{\omega}^2 \tag{7.74}$$

$$\begin{aligned}\text{四维：}(\boldsymbol{I}_4 - \tau\boldsymbol{\omega})^{-1} = {} & \frac{1+\tau^2\|\boldsymbol{\omega}\|^2/2}{1+\tau^2\|\boldsymbol{\omega}\|^2/2+\tau^4\det\boldsymbol{\omega}}\boldsymbol{I}_4 + \\ & \frac{\tau+\tau^3\|\boldsymbol{\omega}\|^2/2}{1+\tau^2\|\boldsymbol{\omega}\|^2/2+\tau^4\det\boldsymbol{\omega}}\boldsymbol{\omega} + \\ & \frac{\tau^2}{1+\tau^2\|\boldsymbol{\omega}\|^2/2+\tau^4\det\boldsymbol{\omega}}\boldsymbol{\omega}^2 + \\ & \frac{\tau^3}{1+\tau^2\|\boldsymbol{\omega}\|^2/2+\tau^4\det\boldsymbol{\omega}}\boldsymbol{\omega}^3\end{aligned} \tag{7.75}$$

对于纯旋转矢量，$\boldsymbol{v} = \boldsymbol{0}$，那么$\boldsymbol{G}(t_k)$简化为

$$\boldsymbol{G}(t_k) = \begin{bmatrix} \boldsymbol{I}_n + 2\tau(\boldsymbol{I}_n - \tau\boldsymbol{\omega})^{-1}\boldsymbol{\omega} & \boldsymbol{0}_{n\times 1} \\ \boldsymbol{0}_{1\times n} & 1 \end{bmatrix} \tag{7.76}$$

因此，式(7.23)约化为

$$[\boldsymbol{I}_n + 2\tau(\boldsymbol{I}_n - \tau\boldsymbol{\omega})^{-1}\boldsymbol{\omega}]^{\mathrm{T}}[\boldsymbol{I}_n + 2\tau(\boldsymbol{I}_n - \tau\boldsymbol{\omega})^{-1}\boldsymbol{\omega}] = \boldsymbol{I}_n \tag{7.77}$$

这正好表明 $\boldsymbol{I}_n + 2\tau(\boldsymbol{I}_n - \tau\boldsymbol{\omega})^{-1}\boldsymbol{\omega}$ 是 $SO(n)$ 的元素。因此数值格式

$$\boldsymbol{x}(t_{k+1}) = [\boldsymbol{I}_n + 2\tau(\boldsymbol{I}_n - \tau\boldsymbol{\omega})^{-1}\boldsymbol{\omega}]\boldsymbol{x}(t_k) \tag{7.78}$$

在每一步迭代均保持了 $\|\boldsymbol{x}\|$ 不变，这确是旋转矢量场所特有的性质。

7.6 $\boldsymbol{S}^{n-1}$ 上的旋转矢量场

保持状态变量的长度不变的矢量场称做是 $\boldsymbol{S}^{n-1}$ 上的矢量场，通过正则化，总可以用 $\boldsymbol{n}$ 来表示其状态变量，其中 $\|\boldsymbol{n}\| = 1$，该矢量场为

$$\dot{\boldsymbol{n}} = \boldsymbol{\omega}(\boldsymbol{n},t)\boldsymbol{n} + \boldsymbol{v}(\boldsymbol{n},t) - (\boldsymbol{v}(\boldsymbol{n},t)\cdot\boldsymbol{n})\boldsymbol{n} \tag{7.79}$$

式中，$\boldsymbol{\omega}(\boldsymbol{n},t)$ 是 $n \times n$ 阶反对称矩阵函数。依然定义

$$X^0(t) := \exp\left[\int_{t_i}^{t} \boldsymbol{v}(\boldsymbol{n}(\xi),\xi)\cdot\boldsymbol{n}(\xi)\mathrm{d}\xi\right] \tag{7.80}$$

这样，方程式(7.79)和式(7.80)就构成了系统式(7.12)($\boldsymbol{X}$ 同式(7.13)中的定义)，而其中的矩阵 $\boldsymbol{A}$ 为

$$\boldsymbol{A} := \begin{bmatrix} \boldsymbol{\omega}(\boldsymbol{n},t) & \boldsymbol{v}(\boldsymbol{n},t) \\ \boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{n},t) & 0 \end{bmatrix} \tag{7.81}$$

它仍然是 $SO_0(n,1)$ 的局部李代数，满足式(7.15)。

数值方法的构造同 7.5 节，其中离散变换矩阵变为

$$\boldsymbol{G}(t_k) = \begin{bmatrix} \boldsymbol{G}_s^s & \boldsymbol{G}_0^s \\ \boldsymbol{G}_s^0 & \boldsymbol{G}_0^0 \end{bmatrix} =$$

$$\begin{bmatrix} \begin{matrix} \boldsymbol{I}_n + 2d\tau^3(\boldsymbol{I}_n - \tau\boldsymbol{\omega})^{-1}\boldsymbol{v}\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{I}_n - \tau\boldsymbol{\omega})^{-1}\boldsymbol{\omega} + \\ 2\tau(\boldsymbol{I}_n - \tau\boldsymbol{\omega})^{-1}\boldsymbol{\omega} + 2d\tau^2(\boldsymbol{I}_n - \tau\boldsymbol{\omega})^{-1}\boldsymbol{v}\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}} \end{matrix} & 2d\tau^3(\boldsymbol{I}_n - \tau\boldsymbol{\omega})^{-1}\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{I}_n - \tau\boldsymbol{\omega})^{-1}\boldsymbol{v} + 2\tau(\boldsymbol{I}_n - \tau\boldsymbol{\omega})^{-1}\boldsymbol{v} \\ 2d\tau^2\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{I}_n - \tau\boldsymbol{\omega})^{-1}\boldsymbol{\omega} + 2d\tau\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}} & 1 + 2d\tau^2\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{I}_n - \tau\boldsymbol{\omega})^{-1}\boldsymbol{v} \end{bmatrix} \tag{7.82}$$

式中
$$d := \frac{1}{1-\tau^2 \boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{I}_n - \tau\boldsymbol{\omega})^{-1}\boldsymbol{v}} \tag{7.83}$$

最后，关于 $\boldsymbol{n}$ 的近似格式是上述变换的一个投影，即
$$\boldsymbol{n}(t_{k+1}) = \frac{\boldsymbol{G}_s^s \boldsymbol{n}(t_k) + \boldsymbol{G}_0^s}{\boldsymbol{G}_s^0 \boldsymbol{n}(t_k) + \boldsymbol{G}_0^0} \tag{7.84}$$

根据式(7.13)，式(7.23) 和式(7.37)，可得
$$\begin{aligned}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}(t_{k+1})\boldsymbol{g}\boldsymbol{X}(t_{k+1}) = {} & [X^0(t_{k+1})]^2(\|\boldsymbol{n}(t_{k+1})\|^2 - 1) = \\ & \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}(t_k)\boldsymbol{g}\boldsymbol{X}(t_k) = \\ & [X^0(t_k)]^2(\|\boldsymbol{n}(t_k)\|^2 - 1) = 0\end{aligned} \tag{7.85}$$

因为 $X^0(t_{k+1}) > 0$ 及 $X^0(t_k) > 0$，所以点 $\boldsymbol{n}(t_k)$ 及 $\boldsymbol{n}(t_{k+1})$ 均落在球面 $\|\boldsymbol{n}(t_{k+1})\| = \|\boldsymbol{n}(t_k)\| = 1$ 之上，这体现了数值方法保持系统的不变量。

7.7　基于 Magnus 展开式的近似方法

7.7.1　线性常微分方程的求解方法

对于线性微分方程式(7.3)，它的解的 Magnus 展开式式(7.4) 及式(7.5) 中的各项 $\boldsymbol{\Omega}_k$ 都是包含算子 $\boldsymbol{A}(t)$ 的多元积分，可用如下方式迭代求出：
$$\begin{aligned}\boldsymbol{\Omega}_1 &= \int_{t_0}^{t} \boldsymbol{A}(s)\mathrm{d}s \\ \boldsymbol{\Omega}_k &= \sum_{j=1}^{k-1} \frac{B_j}{j!}\int_{t_0}^{t} \boldsymbol{S}_k^{(j)}(s)\mathrm{d}s,\ k \geqslant 2\end{aligned} \tag{7.86}$$

式中
$$\begin{aligned}\boldsymbol{S}_k^{(j)} &= \sum_{m=1}^{k-j}[\boldsymbol{\Omega}_m, \boldsymbol{S}_{k-m}^{(j-1)}],\ 2 \leqslant j \leqslant k-1 \\ \boldsymbol{S}_k^{(1)} &= [\boldsymbol{\Omega}_{k-1}, \boldsymbol{A}],\quad \boldsymbol{S}_k^{(k-1)} = [\boldsymbol{\Omega}_1^{k-1}, \boldsymbol{A}]\end{aligned} \tag{7.87}$$

而 B_k 是伯努利数。

应当强调，如果矩阵$\boldsymbol{A}(t)$有界，且 $\|\boldsymbol{A}(t)\|$ 逐段光滑，那么在满足条件

$$K(t) \equiv \int_{t_0}^{t} \|\boldsymbol{A}(\tau)\| \, d\tau < \xi \equiv 1.086\,869$$

的时间 t 的范围内 Magnus 级数绝对收敛。

为了减少交换子的总数，以便于算法设计和减少计算量，可以利用$\boldsymbol{\Omega}$的对称性。以下在一个步长区间$[t_k, t_{k+1}]$($t_k = t_0 + kh$，h 是时间步长）内进行讨论。首先，在 $t_{1/2}^k = t_k + \dfrac{h}{2}$ 时刻，将 $\boldsymbol{A}(t)$ 按泰勒公式展开为

$$\boldsymbol{A}(t) = \sum_{i=0}^{\infty} \boldsymbol{a}_i (t - t_{1/2}^k)^i, \quad \boldsymbol{a}_i = \frac{1}{i!} \left.\frac{d^i \boldsymbol{A}(t)}{dt^i}\right|_{t=t_{1/2}^k} \tag{7.88}$$

用式(7.88) 中 $\boldsymbol{A}(t)$ 的泰勒展开式来计算 Magnus 级数的各项 $\boldsymbol{\Omega}_k$，并利用多重交换子的 Jacobi 恒等式等线性相关性，可得 $\boldsymbol{\Omega}_k (k = 1,\cdots,6)$ 的表达式如下：

$$\left.\begin{aligned}
\boldsymbol{\Omega}_1 &= h\boldsymbol{a}_0 + \frac{1}{12}h^3\boldsymbol{a}_2 + \frac{1}{80}h^5\boldsymbol{a}_4 + \frac{1}{448}h^7\boldsymbol{a}_6 + \cdots \\
\boldsymbol{\Omega}_2 &= -\frac{1}{12}h^3[\boldsymbol{a}_0, \boldsymbol{a}_1] + h^5\left(-\frac{1}{80}[\boldsymbol{a}_0, \boldsymbol{a}_3] + \frac{1}{240}[\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2]\right) + \\
&\qquad h^7\left(-\frac{1}{448}[\boldsymbol{a}_0, \boldsymbol{a}_5] + \frac{1}{2\,240}[\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_4] - \frac{1}{1\,344}[\boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_3]\right) + \cdots \\
\boldsymbol{\Omega}_3 &= h^5\left(\frac{1}{360}[\boldsymbol{a}_0, \boldsymbol{a}_0, \boldsymbol{a}_2] - \frac{1}{240}[\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_0, \boldsymbol{a}_1]\right) + \\
&\qquad h^7\left(\frac{1}{1\,680}[\boldsymbol{a}_0, \boldsymbol{a}_0, \boldsymbol{a}_4] - \frac{1}{2\,240}[\boldsymbol{a}_0, \boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_3] + \right. \\
&\qquad \left.\frac{1}{6\,720}[\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2] + \frac{1}{6\,048}[\boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_0, \boldsymbol{a}_2] - \frac{1}{840}[\boldsymbol{a}_3, \boldsymbol{a}_0, \boldsymbol{a}_1]\right) + \cdots \\
\boldsymbol{\Omega}_4 &= \frac{1}{720}h^5[\boldsymbol{a}_0, \boldsymbol{a}_0, \boldsymbol{a}_0, \boldsymbol{a}_1] +
\end{aligned}\right\}$$

$$\left.\begin{aligned}
&h^7\Big(\frac{1}{6\ 720}[\boldsymbol{a}_0,\boldsymbol{a}_0,\boldsymbol{a}_0,\boldsymbol{a}_3]+\frac{11}{60\ 480}[\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_0,\boldsymbol{a}_0,\boldsymbol{a}_2]-\\
&\frac{1}{7\ 560}[\boldsymbol{a}_0,\boldsymbol{a}_0,\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2]+\frac{1}{4\ 032}[\boldsymbol{a}_0,\boldsymbol{a}_2,\boldsymbol{a}_0,\boldsymbol{a}_1]-\\
&\frac{1}{6\ 720}[\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_0,\boldsymbol{a}_1]\Big)+\cdots\\
\boldsymbol{\Omega}_5&=h^7\Big(\frac{-1}{15\ 120}[\boldsymbol{a}_0,\boldsymbol{a}_0,\boldsymbol{a}_0,\boldsymbol{a}_0,\boldsymbol{a}_2]-\frac{1}{30\ 240}[\boldsymbol{a}_0,\boldsymbol{a}_0,\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_0,\boldsymbol{a}_1]+\\
&\frac{1}{7\ 560}[\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_0,\boldsymbol{a}_0,\boldsymbol{a}_0,\boldsymbol{a}_1]\Big)+\cdots\\
\boldsymbol{\Omega}_6&=h^7\ \frac{-1}{30\ 240}[\boldsymbol{a}_0,\boldsymbol{a}_0,\boldsymbol{a}_0,\boldsymbol{a}_0,\boldsymbol{a}_0,\boldsymbol{a}_1]+\cdots
\end{aligned}\right\}$$

$$(7.89)$$

这里，$[\boldsymbol{a}_{i_1},\boldsymbol{a}_{i_2},\cdots,\boldsymbol{a}_{i_{l-1}},\boldsymbol{a}_{i_l}]\equiv[\boldsymbol{a}_{i_1},[\boldsymbol{a}_{i_2},[\cdots,[\boldsymbol{a}_{i_{l-1}},\boldsymbol{a}_{i_l}]\cdots]]]$。

再引进一元积分，即

$$\boldsymbol{B}^{(i)}=\frac{1}{h^i}\int_{t_k-h/2}^{t_k+h/2}(t-t_k)^k\mathbf{A}\left(t+\frac{h}{2}\right)\mathrm{d}t,\ i=0,1,2,\cdots \tag{7.90}$$

把泰勒级数式(7.88) 代入式(7.90)，可得

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{B}^{(0)}&=h\boldsymbol{a}_0+\frac{1}{12}h^3\boldsymbol{a}_2+\frac{1}{80}h^5\boldsymbol{a}_4+\frac{1}{448}h^7\boldsymbol{a}_6+\cdots\\
\boldsymbol{B}^{(1)}&=\frac{1}{12}h^2\boldsymbol{a}_1+\frac{1}{80}h^4\boldsymbol{a}_3+\frac{1}{448}h^6\boldsymbol{a}_5+\frac{1}{2\ 304}h^8\boldsymbol{a}_7+\cdots\\
\boldsymbol{B}^{(2)}&=\frac{1}{12}h\boldsymbol{a}_0+\frac{1}{80}h^3\boldsymbol{a}_2+\frac{1}{448}h^5\boldsymbol{a}_4+\frac{1}{2\ 304}h^7\boldsymbol{a}_6+\cdots\\
\boldsymbol{B}^{(3)}&=\frac{1}{80}h^2\boldsymbol{a}_1+\frac{1}{448}h^4\boldsymbol{a}_3+\frac{1}{2\ 304}h^6\boldsymbol{a}_5+\frac{1}{11\ 264}h^8\boldsymbol{a}_7+\cdots
\end{aligned} \tag{7.91}$$

经过简单的变量代换，式(7.89) 中的 $\boldsymbol{\Omega}_k$ 可以由式(7.91) 的 $\boldsymbol{B}^{(i)}$ 表示，那么，方程式(7.3) 的近似解如下：

二阶格式：

$$\boldsymbol{U} = \exp(\boldsymbol{\Omega}) = \exp(h\boldsymbol{a}_0) + O(h^3) = \exp(\boldsymbol{B}^{(0)}) + O(h^3) \tag{7.92}$$

四阶格式：

$$\boldsymbol{U} = \exp(\boldsymbol{\Omega}) = \exp(\boldsymbol{\Omega}_1 + \boldsymbol{\Omega}_2) + O(h^5) \tag{7.93}$$

式中

$$\boldsymbol{\Omega}_1 = \boldsymbol{B}^{(0)}$$

$$\boldsymbol{\Omega}_2 = -[\boldsymbol{B}^{(0)}, \boldsymbol{B}^{(1)}]$$

六阶格式：

$$\boldsymbol{U} = \exp(\boldsymbol{\Omega}) = \exp(\boldsymbol{\Omega}_1 + \boldsymbol{\Omega}_2 + \boldsymbol{\Omega}_3 + \boldsymbol{\Omega}_4) + O(h^7) \tag{7.94}$$

式中

$$\boldsymbol{\Omega}_1 = \boldsymbol{B}^{(0)}$$

$$\boldsymbol{\Omega}_2 = \left[\boldsymbol{B}^{(1)}, \frac{3}{2}\boldsymbol{B}^{(0)} - 6\boldsymbol{B}^{(2)}\right]$$

$$\boldsymbol{\Omega}_3 + \boldsymbol{\Omega}_4 = \left[\boldsymbol{B}^{(0)}, \left[\boldsymbol{B}^{(0)}, \frac{1}{2}\boldsymbol{B}^{(2)} - \frac{1}{60}\boldsymbol{\Omega}_2\right]\right] + \frac{3}{5}[\boldsymbol{B}^{(1)}, \boldsymbol{\Omega}_2]$$

八阶格式：

$$\boldsymbol{U} = \exp(\boldsymbol{\Omega}) = \exp(\boldsymbol{\Omega}_1 + \boldsymbol{\Omega}_2 + \boldsymbol{\Omega}_3 + \boldsymbol{\Omega}_4 + \boldsymbol{\Omega}_5 + \boldsymbol{\Omega}_6) + O(h^9) \tag{7.95}$$

式中

$$\boldsymbol{\Omega}_1 = \boldsymbol{B}^{(0)}$$

$$\boldsymbol{\Omega}_2 + \boldsymbol{\Omega}_3 + \boldsymbol{\Omega}_4 + \boldsymbol{\Omega}_5 + \boldsymbol{\Omega}_6 = \boldsymbol{Q}_1 + \boldsymbol{Q}_2 + \boldsymbol{Q}_3 + \boldsymbol{Q}_4 + \boldsymbol{Q}_5 + \boldsymbol{Q}_6 + \boldsymbol{Q}_7$$

式中

$$\boldsymbol{Q}_1 = \left[-\frac{38}{5}\boldsymbol{B}^{(0)} + 24\boldsymbol{B}^{(2)}, \boldsymbol{B}^{(3)}\right]$$

$$\boldsymbol{Q}_2 = \left[\frac{63}{5}\boldsymbol{B}^{(0)} - 84\boldsymbol{B}^{(2)}, -\frac{5}{28}\boldsymbol{B}^{(1)} + \boldsymbol{B}^{(3)}\right]$$

$$\boldsymbol{Q}_3 = \left[\frac{19}{28}\boldsymbol{B}^{(0)} - \frac{15}{7}\boldsymbol{B}^{(2)}, \left[\boldsymbol{B}^{(0)}, \boldsymbol{B}^{(2)} + h\left(\frac{61}{588}\boldsymbol{Q}_1 - \frac{1}{12}\boldsymbol{Q}_2\right)\right]\right]$$

$$\boldsymbol{Q}_4 = \left[\boldsymbol{B}^{(3)}, \frac{20}{7}\boldsymbol{Q}_1 + 10\boldsymbol{Q}_2\right]$$

$$\boldsymbol{Q}_5 = \left[-\frac{6\ 025}{4\ 116}\boldsymbol{B}^{(0)} + \frac{2\ 875}{343}\boldsymbol{B}^{(2)}, [\boldsymbol{B}^{(2)}, \boldsymbol{Q}_1]\right]$$

$$\boldsymbol{Q}_6 = \left[\boldsymbol{B}^{(3)}, \frac{20}{7}(\boldsymbol{Q}_3 + \boldsymbol{Q}_4) + \frac{820}{189}h\boldsymbol{Q}_5\right]$$

$$\boldsymbol{Q}_7 = -\frac{1}{42}\left[\boldsymbol{B}^{(0)}, \left[\boldsymbol{B}^{(0)}, \boldsymbol{Q}_3 - \frac{1}{3}\boldsymbol{Q}_4 + h\boldsymbol{Q}_5\right]\right]$$

进一步可得方程式(7.7)的解。

7.7.2　在 Minkowski 空间构造非线性微分方程的近似解

1. 近似方法

对于一般非线性动力学系统微分方程式(7.1)，记 $\boldsymbol{x}$ 的欧几里得范数为 $\|\boldsymbol{x}\| = (\boldsymbol{x} \circ \boldsymbol{x})^{\frac{1}{2}}$，其中，两个矢量间的点表示它们的内积，那么

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\|\boldsymbol{x}\| = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\boldsymbol{x} \circ \boldsymbol{x})^{\frac{1}{2}} = \frac{\boldsymbol{x} \circ \dot{\boldsymbol{x}}}{\|\boldsymbol{x}\|} \tag{7.96}$$

或

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\|\boldsymbol{x}\| + 100) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\boldsymbol{x} \circ \boldsymbol{x})^{\frac{1}{2}} = \frac{\boldsymbol{x} \circ \dot{\boldsymbol{x}}}{\|\boldsymbol{x}\|} \tag{7.96a}$$

如果动力学系统的运动轨迹可能通过坐标原点时采用方程式(7.96a)。那么，方程式(7.1)和式(7.96)构成了如下的增广动力学系统：

$$\dot{\boldsymbol{X}} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{X} \tag{7.97}$$

式中

$$\boldsymbol{X} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{x} \\ \|\boldsymbol{x}\| \end{bmatrix} \quad 或 \quad \boldsymbol{X} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{x} \\ \|\boldsymbol{x}\| + 100 \end{bmatrix}$$

而 $\boldsymbol{A}$ 同式(7.14)。这样，一般非线性动力学方程在 Minkowski 空间 M^{n+1} 上转化为一个李型方程 $\dot{\boldsymbol{X}} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{X}(\boldsymbol{X} \in M^{n+1}, \boldsymbol{A} \in so(n,1))$，而且原非线性系统内在的对称群性质也显现出来了。也就是说，$\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g}\boldsymbol{X} = 0$ 是非线性动力学系统在 Minkowski 空间须要保证的锥结构。增广动力学系统的空间形式具有很重要的性质，对动力学系统的数值研究具有某种指导意义。基于该空间形式的数值方法不

仅可以近似原动力学系统，而且可以尽可能地保持原系统的定性性质和对称性。为此，在实际应用中数值方法的设计应当是保群的。

微分方程式(7.97)表现为齐次方程的形式，便于使用Magnus级数来求解。即可假设它的数值解为

$$\boldsymbol{X}_{k+1}(t)=\exp(\boldsymbol{\Omega})\boldsymbol{X}_k,\ k=0,1,2,\cdots \tag{7.98}$$

而 $\boldsymbol{\Omega}=\sum_{k=1}^{\infty}\boldsymbol{\Omega}_k$。其中的各项 $\boldsymbol{\Omega}_k$ 是式(7.14)中的矩阵 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x},t)$ 的多元积分，即

$$\left.\begin{aligned}\boldsymbol{\Omega}_1&=\int_{t_k}^{t_{k+1}}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}_k,s)\mathrm{d}s\\ \boldsymbol{\Omega}_k&=\sum_{j=1}^{k-1}\frac{B_j}{j\,!}\int_{t_k}^{t_{k+1}}\boldsymbol{S}_k^{(j)}(\boldsymbol{x}_k,s)\mathrm{d}s,\ k\geqslant 2\end{aligned}\right\} \tag{7.99}$$

式中

$$\left.\begin{aligned}\boldsymbol{S}_k^{(j)}&=\sum_{m=1}^{k-j}[\boldsymbol{\Omega}_m,\boldsymbol{S}_{k-m}^{(j-1)}],\ 2\leqslant j\leqslant k-1\\ \boldsymbol{S}_k^{(1)}&=[\boldsymbol{\Omega}_{k-1},\boldsymbol{A}],\quad \boldsymbol{S}_k^{(k-1)}=[\boldsymbol{\Omega}_1^{k-1},\boldsymbol{A}]\end{aligned}\right\} \tag{7.100}$$

同7.7.1节所述，可充分利用Magnus级数的时间对称性，考虑在 $t_{1/2}^k=t_k+\dfrac{h}{2}$ 时刻 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x},t)$ 的李级数展开，即

$$\boldsymbol{A}=\sum_{i=0}^{\infty}\tilde{\boldsymbol{a}}_i(t-t_{1/2}^k)^i\quad \tilde{\boldsymbol{a}}_i=\frac{1}{i!}\frac{\mathrm{d}^i\boldsymbol{A}}{\mathrm{d}t^i}\bigg|_{t=t_{1/2}^k} \tag{7.101}$$

设 A_{ij}，$i,j=1,2,\cdots,n+1$，是 $\boldsymbol{A}$ 的元素，沿着解曲线 $x_i=x_i(t)$，$i=1,2,\cdots,n$，有

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}A_{ij}}{\mathrm{d}t}&=\left(\frac{\mathrm{d}x_1}{\mathrm{d}t},\frac{\mathrm{d}x_2}{\mathrm{d}t},\cdots,\frac{\mathrm{d}x_n}{\mathrm{d}t},\frac{\mathrm{d}t}{\mathrm{d}t}\right)\left(\frac{\partial A_{ij}}{\partial x_1},\frac{\partial A_{ij}}{\partial x_2},\cdots,\frac{\partial A_{ij}}{\partial x_n},\frac{\partial A_{ij}}{\partial t}\right)^{\mathrm{T}}=\\ &(f_1,f_2,\cdots,f_n,1)\left(\frac{\partial A_{ij}}{\partial x_1},\frac{\partial A_{ij}}{\partial x_2},\cdots,\frac{\partial A_{ij}}{\partial x_n},\frac{\partial A_{ij}}{\partial t}\right)^{\mathrm{T}}=\\ &\boldsymbol{L}A_{ij}\end{aligned}$$

式中

$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{L}(\boldsymbol{x},t) = f_1(\boldsymbol{x},t)\frac{\partial}{\partial x_1} + \cdots + f_n(\boldsymbol{x},t)\frac{\partial}{\partial x_n} + \frac{\partial}{\partial t} = (f_1,\cdots,f_n,1)\left(\frac{\partial}{\partial x_1},\cdots,\frac{\partial}{\partial x_n},\frac{\partial}{\partial t}\right)^{\mathrm{T}} \tag{7.102}$$

$$\frac{\mathrm{d}^2 A_{ij}}{\mathrm{d}t^2} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\mathrm{d}A_{ij}}{\mathrm{d}t}\right) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\boldsymbol{L}A_{ij}) = \frac{\mathrm{d}x_1}{\mathrm{d}t}\frac{\partial}{\partial x_1}[\boldsymbol{L}A_{ij}] + \frac{\mathrm{d}x_2}{\mathrm{d}t}\frac{\partial}{\partial x_2}[\boldsymbol{L}A_{ij}] + \cdots + \frac{\mathrm{d}x_n}{\mathrm{d}t}\frac{\partial}{\partial x_n}[\boldsymbol{L}A_{ij}] + \frac{\partial}{\partial t}[\boldsymbol{L}A_{ij}] = \left(\frac{\mathrm{d}x_1}{\mathrm{d}t},\frac{\mathrm{d}x_2}{\mathrm{d}t},\cdots,\frac{\mathrm{d}x_n}{\mathrm{d}t},1\right)\left(\frac{\partial}{\partial x_1},\frac{\partial}{\partial x_2},\cdots,\frac{\partial}{\partial x_n},\frac{\partial}{\partial t}\right)^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{L}A_{ij}) = \boldsymbol{L}^2 A_{ij}$$

$$\frac{\mathrm{d}^i A_{ij}}{\mathrm{d}t^i} = \boldsymbol{L}^i A_{ij}, \quad i = 0,1,2,\cdots$$

应当指出，上述计算量并不很大，因为 $A_{ij} = 0,\ i,j = 1,2,\cdots,n$。根据上述可以计算出 $t = t_k$ 时刻各阶导数值，最后有

$$\left.\frac{\mathrm{d}^j\boldsymbol{A}}{\mathrm{d}t^j}\right|_{t=t_{1/2}^k} = \sum_{k=j}^{\infty}\left.\frac{\left(\frac{h}{2}\right)^{(k-j)}\mathrm{d}^k\boldsymbol{A}}{(k-j)!\,\mathrm{d}t^k}\right|_{t=t_k} \tag{7.103}$$

考虑到交换子间的线性相关性，同时利用 $\boldsymbol{A}$ 的李级数展开式式(7.101)，可得到由 $\tilde{\boldsymbol{a}}_i$ 表示的 Magnus 级数。

引入积分，有

$$\widetilde{\boldsymbol{B}}^{(i)} = \frac{1}{h^i}\int_{t_k-h/2}^{t_k+h/2}(t-t_k)^i\boldsymbol{A}(\boldsymbol{X},t+\frac{h}{2})\mathrm{d}t,\ i = 0,1,2,\cdots \tag{7.104}$$

将式(7.101) 代入式(7.104)，可得

$$\widetilde{\boldsymbol{B}}^{(0)} = h\tilde{\boldsymbol{a}}_0 + \frac{1}{12}h^3\tilde{\boldsymbol{a}}_2 + \frac{1}{80}h^5\tilde{\boldsymbol{a}}_4 + \frac{1}{448}h^7\tilde{\boldsymbol{a}}_6 + \cdots$$

$$\widetilde{\boldsymbol{B}}^{(1)} = \frac{1}{12}h^2\widetilde{\boldsymbol{a}}_1 + \frac{1}{80}h^4\widetilde{\boldsymbol{a}}_3 + \frac{1}{448}h^6\widetilde{\boldsymbol{a}}_5 + \frac{1}{2\,304}h^8\widetilde{\boldsymbol{a}}_7 + \cdots$$

$$\widetilde{\boldsymbol{B}}^{(2)} = \frac{1}{12}h\widetilde{\boldsymbol{a}}_0 + \frac{1}{80}h^3\widetilde{\boldsymbol{a}}_2 + \frac{1}{448}h^5\widetilde{\boldsymbol{a}}_4 + \frac{1}{2\,304}h^7\widetilde{\boldsymbol{a}}_6 + \cdots$$

$$\widetilde{\boldsymbol{B}}^{(3)} = \frac{1}{80}h^2\widetilde{\boldsymbol{a}}_1 + \frac{1}{448}h^4\widetilde{\boldsymbol{a}}_3 + \frac{1}{2\,304}h^6\widetilde{\boldsymbol{a}}_5 + \frac{1}{11\,264}h^8\widetilde{\boldsymbol{a}}_7 + \cdots \tag{7.105}$$

利用 $\widetilde{\boldsymbol{B}}^{(i)}$ 可简单表示 $\boldsymbol{\Omega}_k$，例如，$\boldsymbol{\Omega}_1 = \widetilde{\boldsymbol{B}}^{(0)}$。记

$$\boldsymbol{X}(t_k) = \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}(t_k) \\ \| \boldsymbol{x}(t_k) \| \end{bmatrix}$$

那么，可得式(7.97)的如下近似格式：

二阶格式：

$$\boldsymbol{X}(t_{k+1}) = \exp(\widetilde{\boldsymbol{B}}^{(0)})\boldsymbol{X}(t_k) = \exp(\widetilde{\boldsymbol{a}}_0)\boldsymbol{X}(t_k) \tag{7.106}$$

四阶格式：

$$\boldsymbol{X}(t_{k+1}) = \exp(\widetilde{\boldsymbol{B}}^{(0)} - [\widetilde{\boldsymbol{B}}^{(0)}, \widetilde{\boldsymbol{B}}^{(1)}])\boldsymbol{X}(t_k) \tag{7.107}$$

六阶格式：

$$\boldsymbol{X}(t_{k+1}) = \exp(\widetilde{\boldsymbol{\Omega}})\boldsymbol{X}(t_k) = \exp(\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}_1 + \widetilde{\boldsymbol{\Omega}}_2 + \widetilde{\boldsymbol{\Omega}}_3 + \widetilde{\boldsymbol{\Omega}}_4)\boldsymbol{X}(t_k) \tag{7.108}$$

式中

$$\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}_1 = \widetilde{\boldsymbol{B}}^{(0)}$$

$$\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}_2 = \left[\widetilde{\boldsymbol{B}}^{(1)}, \frac{3}{2}\widetilde{\boldsymbol{B}}^{(0)} - 6\widetilde{\boldsymbol{B}}^{(2)}\right]$$

$$\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}_3 + \widetilde{\boldsymbol{\Omega}}_4 = \left[\widetilde{\boldsymbol{B}}^{(0)}, \left[\widetilde{\boldsymbol{B}}^{(0)}, \frac{1}{2}h\widetilde{\boldsymbol{B}}^{(2)} - \frac{1}{60}\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}_2\right]\right] + \frac{3}{5}[\widetilde{\boldsymbol{B}}^{(1)}, \widetilde{\boldsymbol{\Omega}}_2]$$

八阶格式：

$$\boldsymbol{X}(t_{k+1}) = \exp(\widetilde{\boldsymbol{\Omega}})\boldsymbol{X}(t_k) = \exp(\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}_1 + \widetilde{\boldsymbol{\Omega}}_2 + \widetilde{\boldsymbol{\Omega}}_3 + \widetilde{\boldsymbol{\Omega}}_4 + \widetilde{\boldsymbol{\Omega}}_5 + \widetilde{\boldsymbol{\Omega}}_6)\boldsymbol{X}(t_k) \tag{7.109}$$

式中

$$\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}_1 = \widetilde{\boldsymbol{B}}^{(0)}$$

$$\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}_2 + \widetilde{\boldsymbol{\Omega}}_3 + \widetilde{\boldsymbol{\Omega}}_4 + \widetilde{\boldsymbol{\Omega}}_5 + \widetilde{\boldsymbol{\Omega}}_6 = \widetilde{\boldsymbol{Q}}_1 + \widetilde{\boldsymbol{Q}}_2 + \widetilde{\boldsymbol{Q}}_3 + \widetilde{\boldsymbol{Q}}_4 + \widetilde{\boldsymbol{Q}}_5 + \widetilde{\boldsymbol{Q}}_6 + \widetilde{\boldsymbol{Q}}_7$$

式中

$$\widetilde{\boldsymbol{Q}}_1 = \left[-\frac{38}{5}\widetilde{\boldsymbol{B}}^{(0)} + 24\widetilde{\boldsymbol{B}}^{(2)}, \widetilde{\boldsymbol{B}}^{(3)}\right]$$

$$\widetilde{\boldsymbol{Q}}_2 = \left[\frac{63}{5}\widetilde{\boldsymbol{B}}^{(0)} - 84\widetilde{\boldsymbol{B}}^{(2)}, -\frac{5}{28}\widetilde{\boldsymbol{B}}^{(1)} + \widetilde{\boldsymbol{B}}^{(3)}\right]$$

$$\widetilde{\boldsymbol{Q}}_3 = \left[\frac{19}{28}\widetilde{\boldsymbol{B}}^{(0)} - \frac{15}{7}\widetilde{\boldsymbol{B}}^{(2)}, \left[\widetilde{\boldsymbol{B}}^{(0)}, \widetilde{\boldsymbol{B}}^{(2)} + h\left(\frac{61}{588}\widetilde{\boldsymbol{Q}}_1 - \frac{1}{12}\widetilde{\boldsymbol{Q}}_2\right)\right]\right]$$

$$\widetilde{\boldsymbol{Q}}_4 = \left[\widetilde{\boldsymbol{B}}^{(3)}, \frac{20}{7}\widetilde{\boldsymbol{Q}}_1 + 10\widetilde{\boldsymbol{Q}}_2\right]$$

$$\widetilde{\boldsymbol{Q}}_5 = \left[-\frac{6\ 025}{4\ 116}\widetilde{\boldsymbol{B}}^{(0)} + \frac{2\ 875}{343}\widetilde{\boldsymbol{B}}^{(2)}, [\widetilde{\boldsymbol{B}}^{(2)}, \widetilde{\boldsymbol{Q}}_1]\right]$$

$$\widetilde{\boldsymbol{Q}}_6 = \left[\widetilde{\boldsymbol{B}}^{(3)}, \frac{20}{7}(\widetilde{\boldsymbol{Q}}_3 + \widetilde{\boldsymbol{Q}}_4) + \frac{820}{189}h\widetilde{\boldsymbol{Q}}_5\right]$$

$$\widetilde{\boldsymbol{Q}}_7 = -\frac{1}{42}\left[\widetilde{\boldsymbol{B}}^{(0)}, \left[\widetilde{\boldsymbol{B}}^{(0)}, \widetilde{\boldsymbol{Q}}_3 - \frac{1}{3}\widetilde{\boldsymbol{Q}}_4 + h\widetilde{\boldsymbol{Q}}_5\right]\right]$$

式中，$\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}$ 和 $\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}_i$ 分别是 $\boldsymbol{\Omega}$ 和 $\boldsymbol{\Omega}_i$ 的近似，最后取前 n 个分量，得

$$\boldsymbol{x}(t_{k+1}) = (X_1(t_{k+1}), X_2(t_{k+1}), \cdots, X_n(t_{k+1}))^{\mathrm{T}},\quad k = 0,1,2,\cdots \tag{7.110}$$

即为所求的原微分方程式(7.1)的数值解。

不难证明本节所得到的近似格式是关于时间对称的，所以可以采用 Yoshida 技术构造高阶的近似格式。

2. 李级数展开迭代规律

李级数展开式(7.101)可由如下方式迭代产生：

$$\left.\begin{aligned} & L_i^0 = f_i \\ & L_i^1 = \boldsymbol{L}f_i = (f_1, f_2, \cdots, f_n, 1)\left(\frac{\partial f_i}{\partial x_1}, \frac{\partial f_i}{\partial x_2}, \cdots, \frac{\partial f_i}{\partial x_n}, \frac{\partial f_i}{\partial t}\right)^{\mathrm{T}}, \\ & \qquad i = 1,2,\cdots,n \end{aligned}\right\}$$

$$\left.\begin{aligned}
L_i^2 &= \boldsymbol{L}^2 f_i = (L_1^1, L_2^1, \cdots, L_n^1)\left(\frac{\partial f_i}{\partial x_1}, \frac{\partial f_i}{\partial x_2}, \cdots, \frac{\partial f_i}{\partial x_n}\right)^{\mathrm{T}} + \\
&\quad (f_1, f_2, \cdots, f_n, 1)\left(\boldsymbol{L}\frac{\partial f_i}{\partial x_1}, \boldsymbol{L}\frac{\partial f_i}{\partial x_2}, \cdots, \boldsymbol{L}\frac{\partial f_i}{\partial x_n}, \boldsymbol{L}\frac{\partial f_i}{\partial t}\right)^{\mathrm{T}}, \\
&\quad i = 1, 2, \cdots, n \\
L_i^k &= \boldsymbol{L}^k f_i = C_{k-1}^0 (L_1^{k-1}, L_2^{k-1}, \cdots, L_n^{k-1})\left(\frac{\partial f_i}{\partial x_1}, \frac{\partial f_i}{\partial x_2}, \cdots, \frac{\partial f_i}{\partial x_n}\right)^{\mathrm{T}} + \\
&\quad C_{k-1}^1 (L_1^{k-2}, L_2^{k-2}, \cdots, L_n^{k-2})\left(\boldsymbol{L}\frac{\partial f_i}{\partial x_1}, \boldsymbol{L}\frac{\partial f_i}{\partial x_2}, \cdots, \boldsymbol{L}\frac{\partial f_i}{\partial x_n}\right)^{\mathrm{T}} + \\
&\quad \cdots + C_{k-1}^{k-1} (f_1, f_2, \cdots, f_n, 1) \cdot \\
&\quad \left(\boldsymbol{L}^{k-1}\frac{\partial f_i}{\partial x_1}, \boldsymbol{L}^{k-1}\frac{\partial f_i}{\partial x_2}, \cdots, \boldsymbol{L}^{k-1}\frac{\partial f_i}{\partial x_n}, \boldsymbol{L}^{k-1}\frac{\partial f_i}{\partial t}\right)^{\mathrm{T}}, \\
&\quad i = 1, 2, \cdots, n,\ k = 1, 2, \cdots
\end{aligned}\right\} \tag{7.111}$$

由上述可见，要计算 L_i^k，只需在 L_i^{k-1} 的基础上进一步计算 $\boldsymbol{L}^{k-1}\dfrac{\partial f_i}{\partial t}$ 和 $\boldsymbol{L}^{k-1}\dfrac{\partial f_i}{\partial x_j}$，$j = 1, 2, \cdots, n$ 即可。另外，还有

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}^k A_{ij}}{\mathrm{d}t^k} &= \boldsymbol{L}^k A_{ij} = \boldsymbol{L}^k \frac{f_i}{\|\boldsymbol{x}\|} = \\
&\quad C_k^0 \frac{1}{\|\boldsymbol{x}\|}\boldsymbol{L}^k f_i + C_k^1 \boldsymbol{L}^{k-1} f_i \boldsymbol{L}\frac{1}{\|\boldsymbol{x}\|} + \cdots + \\
&\quad C_k^m \boldsymbol{L}^{k-m} f_i \boldsymbol{L}^m \frac{1}{\|\boldsymbol{x}\|} + \cdots + C_k^k f_i \boldsymbol{L}^k \frac{1}{\|\boldsymbol{x}\|}
\end{aligned} \tag{7.112}$$

上述算出 $t = t_k$ 时刻的各阶导数值，而后有

$$\left.\frac{\mathrm{d}^k A_{ij}}{\mathrm{d}t^k}\right|_{t=t_{1/2}^k} = \sum_{l=k}^{\infty} \left.\frac{\left(\dfrac{h}{2}\right)^{(l-k)} \mathrm{d}^l A_{ij}}{(l-k)!\,\mathrm{d}t^l}\right|_{t=t_k} \tag{7.113}$$

$$i = 1, 2, \cdots, n,\ j = n+1;\ i = n+1,\ j = 1, 2, \cdots, n$$

那么，不难计算式(7.101)。

3. 保群性质示例

用李群方法求解增广动力学系统自然保持系统的锥结构，数

值实验显示可以近似保持原系统的某些定性性质，而且数值计算更加精确、稳定。本节就旋转体问题简单证明上一节给出的数值方法的保群性质。对于旋转体问题，式(7.14)中的 $\boldsymbol{A}$ 变为

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{\omega}(\boldsymbol{x},t) & 0\\ 0 & 0\end{bmatrix} \tag{7.114}$$

式中，$\boldsymbol{\omega}(\boldsymbol{x},t)$ 是一个 $n\times n$ 阶反对称矩阵。那么，零锥结构 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g}\boldsymbol{X}=0$ 自然满足。对于式(7.114)对应的动力学问题必然有近似解 $\boldsymbol{X}_{k+1}=\exp\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}\boldsymbol{X}_k$，其中，$\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}$ 即数值算法式(7.106)至式(7.109)中的 $\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}$。显然，有

$$\exp\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}=\begin{bmatrix}\exp\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}' & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix} \tag{7.115}$$

式中，$\exp\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}'=\exp\boldsymbol{\omega}(\boldsymbol{x},t)$。而且

$$\boldsymbol{x}_{k+1}=\exp\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}'\boldsymbol{x}_k \tag{7.116}$$

由于基于 Magnus 级数的数值方法能保持动力学系统的李群性质，那么，根据方程式(7.97)的代数结构式(7.22)，必然有

$$(\exp\widetilde{\boldsymbol{\Omega}})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g}\exp\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}=\boldsymbol{g} \tag{7.117}$$

由式(7.115)和式(7.117)可得

$$(\exp\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}')^{\mathrm{T}}\exp\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}'=\boldsymbol{I}_n \tag{7.118}$$

式(7.118)正说明了 $\exp\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}'$ 属于 n 阶特殊正交群 $SO(n)$。也就是说，数值方法式(7.116)保持 $\|\boldsymbol{x}\|$ 不变，这正是原系统的旋转矢量所要求的。

4. 算例

【例 7.1】 求解非线性周期系统的响应问题：

$$\begin{cases}\dot{x}_1=x_2\\ \dot{x}_2=-2.25x_1-(x_1-1.5\sin t)^3+2\sin t\\ x_1(0)=0.0,\ x_2(0)=1.599\,29\end{cases}$$

取时间步长 $h=0.1$，采用二阶近似格式式(7.106)，数值解与

精确解比较所得误差见图 7.1 和图 7.2(略优于例 2.1 的结果)。

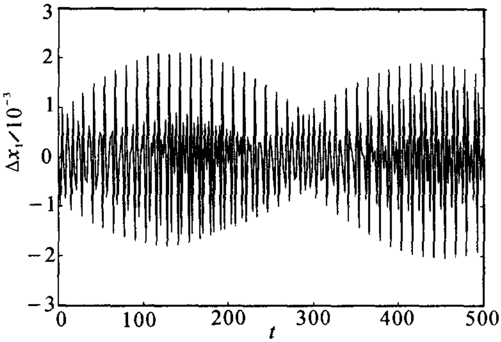


图 7.1　变量 x_1 的误差

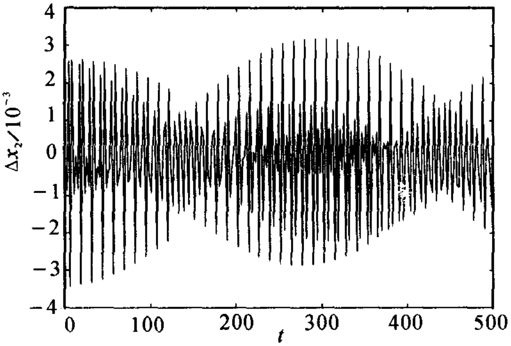


图 7.2　变量 x_2 的误差

【例 7.2】　求解如下常微分方程初值问题：

$$\ddot{x} = -(\dot{x})^2 - x + \ln t,\ x(1) = 0,\ \dot{x}(1) = 1$$

将上面二阶方程变为一阶常微分方程组：

$$\begin{cases} \dot{x}_1 = x_2, & x_1(1) = 0 \\ \dot{x}_2 = -x_1 - x_2^2 + \ln t, & x_2(1) = 1 \end{cases}$$

可以采用近似格式(7.106)至式(7.107)进行计算。图7.3和图7.4分别显示了步长$h=0.6$和$h=0.5$时采用二阶格式计算所得x的数值解的误差Δx，图7.5和图7.6分别给出了步长$h=1.35$和$h=1.0$时采用四阶格式计算所得x的数值解的误差。

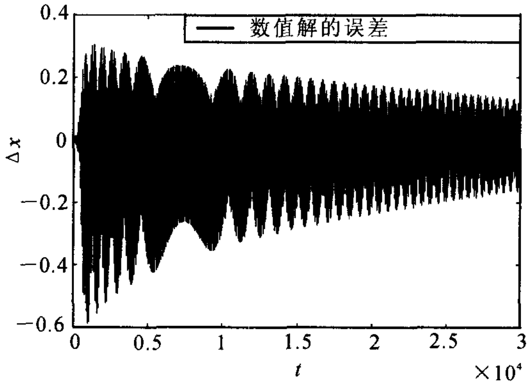


图7.3　$h=0.6$时二阶近似解的误差

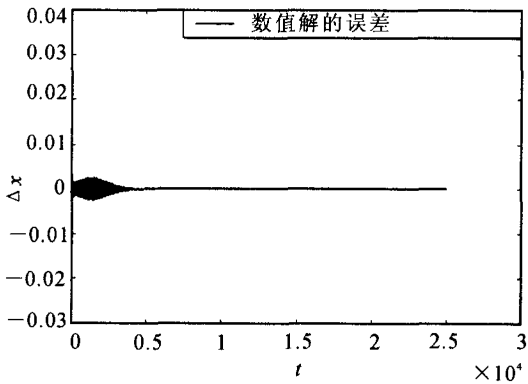


图7.4　$h=0.5$时二阶近似解的误差

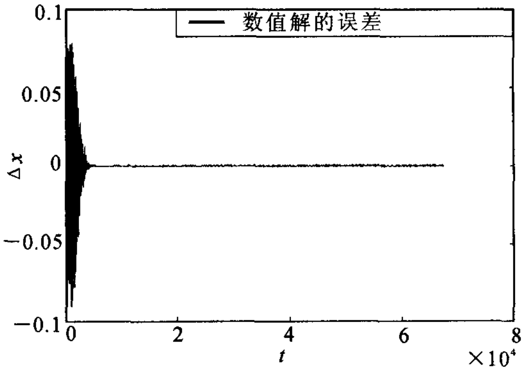


图 7.5　$h = 1.35$ 时四阶近似解的误差

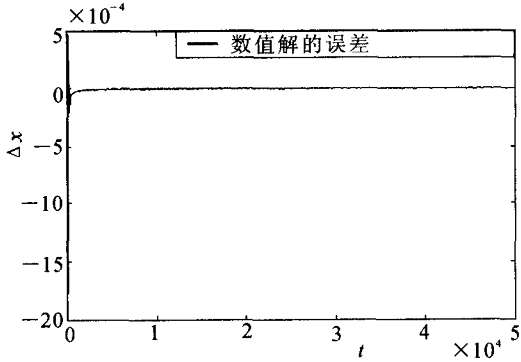


图 7.6　$h = 1.0$ 时四阶近似解的误差

7.7.3　一个简单易行的四阶积分法

1. 近似格式

由前述式(7.99)可知，式(7.97)解的 Magnus 级数展开的前两项为

$$\boldsymbol{\Omega}_1 = \int_{t_0}^{t} \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x},s)\mathrm{d}s, \quad \boldsymbol{\Omega}_2 = \frac{1}{2}\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}s_1\int_{t_0}^{s_1}\mathrm{d}s_2[\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x},s_1),\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x},s_2)] \tag{7.119}$$

为了提高效率和简化方法，在此采用一元积分表示的 Magnus 级数形式[28~29]。在一个步长区间$[t_k, t_{k+1}]$内讨论问题，并记$\widetilde{\boldsymbol{A}}^{(i)}$ $(i=0,1)$ 是关于 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x},t)$ 的如下积分：

$$\widetilde{\boldsymbol{A}}^{(i)} = \frac{1}{h^i}\int_{t_k-h/2}^{t_k+h/2}(t-t_k)^i\boldsymbol{A}\left(\boldsymbol{x}(t_k), t+\frac{h}{2}\right)\mathrm{d}t,$$
$$i=0,1,\ k=0,1,2,\cdots \tag{7.120}$$

用不同的积分公式近似计算上式中的积分就得到不同的算法，这里采用四阶的高斯-拉盖尔积分公式来计算式(7.120)，即

$$\begin{aligned}\widetilde{\boldsymbol{A}}^{(0)} &= \frac{h}{2}(\widetilde{\boldsymbol{A}}_1+\widetilde{\boldsymbol{A}}_2)+O(h^5)\\ \widetilde{\boldsymbol{A}}^{(1)} &= \frac{\sqrt{3}h}{12}(\widetilde{\boldsymbol{A}}_2-\widetilde{\boldsymbol{A}}_1)+O(h^5)\end{aligned} \tag{7.121}$$

式中，$\widetilde{\boldsymbol{A}}_i = \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}(t_k+c_ih),\ t_k+c_ih)$，$i=1,2$，$c_{1,2}=\dfrac{1}{2}\mp\dfrac{\sqrt{3}}{6}$。

根据式(7.119) 和式(7.120) 可得在一个时间步长范围内 $\boldsymbol{\Omega}$ 的两个四阶近似表达式，即

$$\boldsymbol{\Omega} = \boldsymbol{\Omega}_1+\boldsymbol{\Omega}_2+O(h^5) = \widetilde{\boldsymbol{A}}^{(0)}+[\widetilde{\boldsymbol{A}}^{(1)}, \widetilde{\boldsymbol{A}}^{(0)}]+O(h^5) \tag{7.122}$$

为了避免计算交换子，采用分裂技术和应用 BCH 公式可得非线性方程式(7.97) 的四阶近似格式，即

$$\begin{aligned}\boldsymbol{X}(t_{k+1}) &= \exp\boldsymbol{\Omega}\cdot\boldsymbol{X}(t_k) = \\ &\exp\left(\frac{1}{2}\widetilde{\boldsymbol{A}}^{(0)}+2\widetilde{\boldsymbol{A}}^{(1)}\right)\cdot\\ &\exp\left(\frac{1}{2}\widetilde{\boldsymbol{A}}^{(0)}-2\widetilde{\boldsymbol{A}}^{(1)}\right)\boldsymbol{X}(t_k)+O(h^5) = \\ &\exp\widetilde{\boldsymbol{A}}^{(1)}\exp\widetilde{\boldsymbol{A}}^{(0)}\exp(-\widetilde{\boldsymbol{A}}^{(1)})\boldsymbol{X}(t_k)+O(h^5),\\ &k=0,1,2,\cdots\end{aligned} \tag{7.123}$$

而指数矩阵 $\exp\widetilde{\boldsymbol{A}}^{(i)}$ $(i=0,1)$ 中 $\widetilde{\boldsymbol{A}}^{(i)}$ 的方幂具有如下形式：

$$(\widetilde{\boldsymbol{A}}^{(i)})^{(k)} = \| \boldsymbol{F}^{(i)} \|^{k-1} \begin{bmatrix} \boldsymbol{0}_{n\times n} & \boldsymbol{F}^{(i)} \\ \boldsymbol{F}^{(i)T} & 0 \end{bmatrix},$$

$$k \text{ 是正奇数}, i = 0,1 \tag{7.124}$$

$$(\widetilde{\boldsymbol{A}}^{(i)})^{k} = \| \boldsymbol{F}^{(i)} \|^{k-2} \begin{bmatrix} \boldsymbol{F}^{(i)}\boldsymbol{F}^{(i)T} & \boldsymbol{0}_{n\times 1} \\ \boldsymbol{0}_{1\times n} & \| \boldsymbol{F}^{(i)} \|^{2} \end{bmatrix},$$

$$k \text{ 是正偶数} \tag{7.125}$$

式中

$$\boldsymbol{F}^{(0)} = \frac{h}{2}\left(\frac{\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}(t_k + c_1 h), t_k + c_1 h)}{\| \boldsymbol{x}(t_k + c_1 h) \|} + \frac{\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}(t_k + c_0 h), t_k + c_0 h)}{\| \boldsymbol{x}(t_k + c_0 h) \|}\right) \tag{7.126}$$

$$\boldsymbol{F}^{(1)} = \frac{\sqrt{3}h}{12}\left(\frac{\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}(t_k + c_1 h), t_k + c_1 h)}{\| \boldsymbol{x}(t_k + c_1 h) \|} - \frac{\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}(t_k + c_0 h), t_k + c_0 h)}{\| \boldsymbol{x}(t_k + c_0 h) \|}\right) \tag{7.127}$$

这样，就可以更有效地计算指数矩阵，即

$$\exp\widetilde{\boldsymbol{A}}^{(i)} = \boldsymbol{I} + \sinh \| \boldsymbol{F}^{(i)} \| / \| \boldsymbol{F}^{(i)} \| \cdot \widetilde{\boldsymbol{A}}^{(i)} + (\cosh \| \boldsymbol{F}^{(i)} \| - 1) / \| \boldsymbol{F}^{(i)} \|^{2} \cdot (\widetilde{\boldsymbol{A}}^{(i)})^{2} \tag{7.128}$$

式中，$\boldsymbol{F} = \boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}(t), t) = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}(t), t) / \| \boldsymbol{x}(t) \|$。而式(7.126)至式(7.127)中的$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}(t_k + c_i h), t_k + c_i h)$可由李级数展开的办法获得，即

$$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}(t_k + c_i h), t_k + c_i h) = \boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}(t_k), t_k) + c_i h \boldsymbol{L}\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}(t_k), t_k) + \frac{1}{2!} c_i^2 h^2 \boldsymbol{L}^2 \boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}(t_k), t_k) + \cdots + \frac{1}{n!} c_i^n h^n \boldsymbol{L}^n \boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}(t_k), t_k) + \cdots \tag{7.129}$$

这里的算子 $\boldsymbol{L}$ 同式(7.102)，最后可得式(7.1)的解为

$$\boldsymbol{x}(t_{k+1}) = (X_1(t_{k+1}), X_2(t_{k+1}), \cdots, X_n(t_{k+1}))^{\mathrm{T}},$$

$$k = 0,1,2,\cdots \tag{7.130}$$

不难证明该方法是时间对称的。本小节设计的四阶积分方法包含二个或三个指数矩阵的乘积，避免了 Magnus 级数方法的交换子运算。

2. 算例

【例 7.3】　求解非线性周期系统的响应问题：

$$\begin{cases}\dot{x}_1 = x_2 \\ \dot{x}_2 = -2.25x_1 - (x_1 - 1.5\sin t)^3 + 2\sin t \\ x_1(0) = 0.0,\ x_2(0) = 1.599\,29\end{cases}$$

依然取步长 $h = 0.1$，采用近似格式式(7.123)，数值解与精确解比较所得误差见图7.7和图7.8，其中 Δx_1，Δx_2 分别是 x_1 和 x_2 的误差。

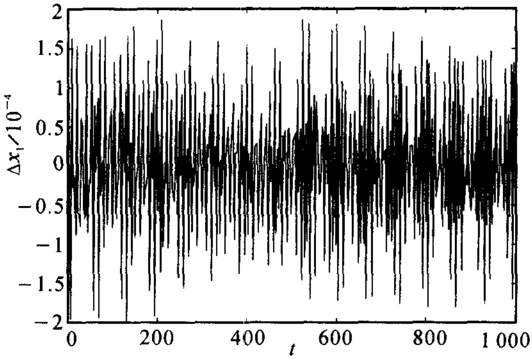


图 7.7　变量 x_1 的误差

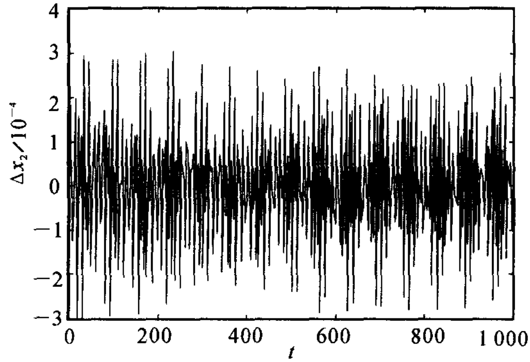


图 7.8　变量 x_2 的误差

【例 7.4】 求单摆的运动规律。设有一单摆，摆球为单位质量 $m=1$，摆长为 l，摆动的幅角为 x_1，在重力作用下无阻尼的单摆运动方程为

$$\ddot{x}_1+\omega_0^2\sin x_1=0$$

式中，$\omega_0=\sqrt{\frac{g}{l}}$，$g$ 为重力加速度。单摆运动方程又可以写为

$$\begin{cases}\dot{x}_1=x_2\\ \dot{x}_2=-\omega_0^2\sin x_1\end{cases}$$

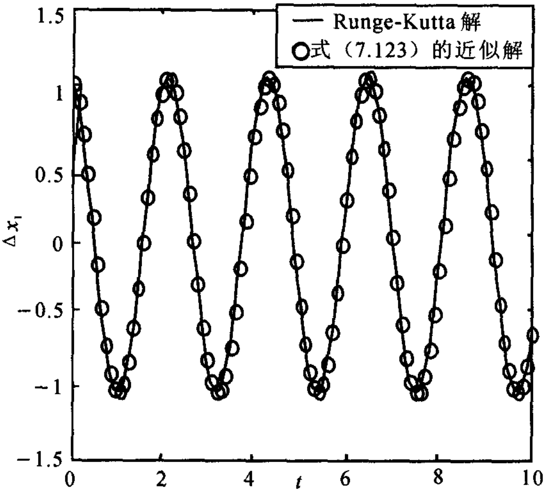


图 7.9　x_1 的近似解与 Runge-Kutta 近似解的比较

取时间步长 $h=0.1$，采用近似格式式(7.123) 所得数值解与由 Runge-Kutta 方法所得近似解的比较见图 7.9 和图 7.10。在相平面(x_1,x_2) 上，有

$$\frac{\mathrm{d}x_2}{\mathrm{d}x_1}=-\frac{\omega_0^2\sin x_1}{x_2}$$

积分上式可得

$$\frac{1}{2}x_2^2+\omega_0^2(1-\cos x_1)=H$$

式中，H 为积分常数。由于 x_2 是角速度，因而$\frac{1}{2}x_2^2$ 可以视为单摆系统的动能 K；而系统的恢复力为 $-\omega_0^2\sin x_1$，克服此力所做的功为

$$\int_0^{x_1}\omega_0^2\sin x_1\mathrm{d}x_1=\omega_0^2(1-\cos x_1)$$

该式即是系统的位能 V。又有

$$K=\frac{1}{2}x_2^2,\quad V=\omega_0^2(1-\cos x_1)$$

则 $H=K+V$ 正是系统的能量守恒定律。那么，单摆的运动方程可以写成 Hamilton 系统形式，即

$$\begin{cases}\dot{x}_1=\dfrac{\partial H}{\partial x_2}\\ \dot{x}_2=-\dfrac{\partial H}{\partial x_1}\end{cases}$$

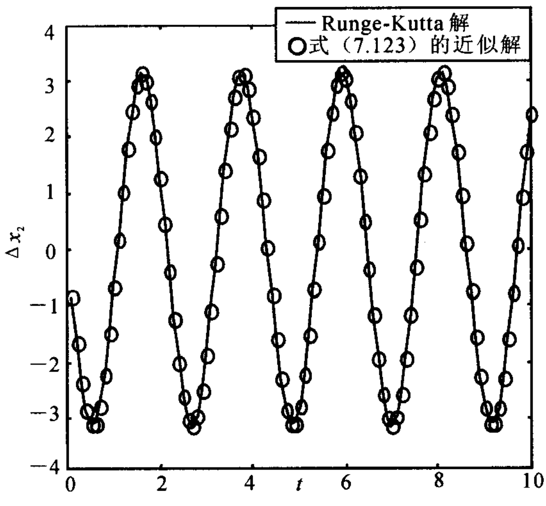


图 7.10　x_2 的近似解与 Runge-Kutta 近似解的比较

Hamilton 系统最重要的性质特征是它的能量函数或称 Hamilton 函数 H 是守恒的。分别采用近似格式式(7.123)和四阶 Runge-Kutta 方法计算，所得不同时刻 Hamilton 函数与初始 Hamilton 函数比较的误差如图 7.11 所示。由图可见，该方法在保持系统定性性质方面具有明显优势。

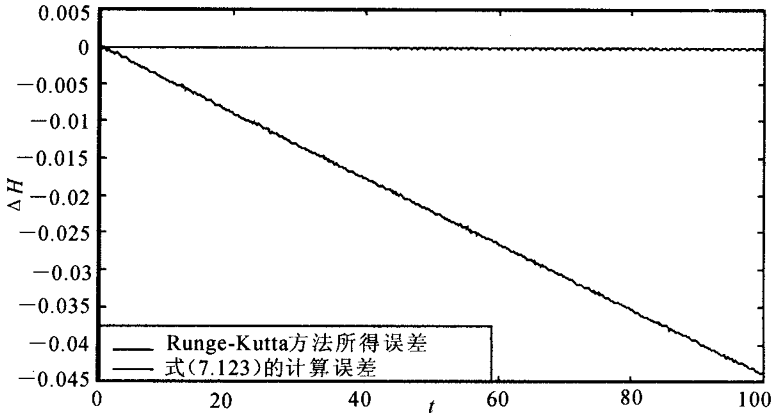


图 7.11　书中近似方法和 Runge-Kutta 近似方法所得 Hamilton 函数的误差比较

7.7.4　基于解算子的 Magnus 展开式构造非线性微分方程的近似解法

1. 近似解法

根据文献[14]，一般非线性动力学方程式(7.1)可以表示为

$$\dot{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{L}_f \boldsymbol{x} \tag{7.131}$$

式中

$$\boldsymbol{L}_f = \sum_{i=1}^{n} f_i(\boldsymbol{x}, t) \frac{\partial}{\partial x_i} \tag{7.132}$$

是一个微分算子，它也是线性算子。这样，线性映射作用成为原微分方程的新模式，本节旨在基于 Magnus 级数方法来寻求一个解

算子 $\boldsymbol{\Psi}(\boldsymbol{x},t)$，简记为 $\boldsymbol{\Psi}$，使得

$$\boldsymbol{x}(t)=\boldsymbol{\Psi}\boldsymbol{x}_0 \tag{7.133}$$

沿解曲线，有

$$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x},t)=\boldsymbol{\Psi}\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_0,t) \tag{7.134}$$

那么，方程式(7.1)可写为

$$\dot{\boldsymbol{\Psi}}\boldsymbol{x}_0=\boldsymbol{\Psi}\boldsymbol{L}_{f(x_0,t)}\boldsymbol{x}_0 \tag{7.135}$$

所以 $\boldsymbol{\Psi}$ 满足如下方程：

$$\dot{\boldsymbol{\Psi}}=\boldsymbol{\Psi}\boldsymbol{L}_{f(x_0,t)},\quad \boldsymbol{\Psi}(\boldsymbol{x}_0,t_0)=\boldsymbol{I} \tag{7.136}$$

下面应用 Magnus 展开式近似构造 $\boldsymbol{\Psi}$。假设 $\boldsymbol{\Psi}=\exp(\boldsymbol{L}_{\overline{\boldsymbol{\Omega}}(x_0,t)})$，式中，$\overline{\boldsymbol{\Omega}}(\boldsymbol{x}_0,t)=\sum_{k=1}^{\infty}\overline{\boldsymbol{\Omega}}_k(\boldsymbol{x}_0,k)$，那么，级数的前两项为

$$\begin{aligned}\overline{\boldsymbol{\Omega}}_1(\boldsymbol{x}_0,t)&=\int_{t_0}^{t}\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_0,s)\mathrm{d}s\\ \overline{\boldsymbol{\Omega}}_2(\boldsymbol{x}_0,t)&=-\frac{1}{2}\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}s_1\int_{t_0}^{s_1}\mathrm{d}s_2[\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_0,s_1),\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_0,s_2)]\end{aligned} \tag{7.137}$$

式中，$[\boldsymbol{f},\boldsymbol{g}]=\boldsymbol{h}$ 是对应于两个矢量场的李括号的一个新矢量场。其分量为

$$h_i=[\boldsymbol{f},\boldsymbol{g}]_i=\boldsymbol{L}_f g_i-\boldsymbol{L}_g f_i=\sum_{j=1}^{\infty}\left(f_j\frac{\partial g_i}{\partial x_j}-g_j\frac{\partial f_i}{\partial x_j}\right) \tag{7.138}$$

对应于两个算子 $\boldsymbol{L}_f$ 和 $\boldsymbol{L}_g$ 的交换子是

$$\boldsymbol{L}_h=[\boldsymbol{L}_f,\boldsymbol{L}_g]=\boldsymbol{L}_f\boldsymbol{L}_g-\boldsymbol{L}_g\boldsymbol{L}_f \tag{7.139}$$

因为算子形式的微分方程式(7.135)中，$\boldsymbol{L}_f$ 的位置在右边，$\overline{\boldsymbol{\Omega}}_2$ 的符号变了，后面近似格式中的交换子运算都做了同样的处理。如果对于所有的 s_1 和 s_2，$[\boldsymbol{L}_{f(x_0,s_1)},\boldsymbol{L}_{f(x_0,s_2)}]=0$ 恒成立，那么显含时间 t 的微分方程式(7.135)的解算子为 $\boldsymbol{\Psi}=\exp\left(\int_{t_0}^{t}\boldsymbol{L}_{f(x_0,t)}\mathrm{d}s\right)$。不显含时间 t 的动力学方程显然属于这种情况，而且它的 Magnus 级数方法对应于第二章的李级数解法。

同 7.7.1 节一样，为了利用 Magnus 级数方法的时间对称性，在 $t_{1/2}^k = t_k + \frac{h}{2}$ 时刻，将 $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x},t)$ 进行李级数展开，得

$$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x},t) = \sum_{j=0}^{\infty} \bar{\boldsymbol{a}}_j (t - t_{1/2}^k)^j \tag{7.140}$$

式中

$$\bar{\boldsymbol{a}}_j = \frac{1}{j!} \frac{\mathrm{d}^j \boldsymbol{f}}{\mathrm{d}t^j}\bigg|_{t=t_{1/2}^k} \tag{7.141}$$

沿解曲线 $x_i = x_i(t)$，$i = 1,2,\cdots,n$，对于 $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x},t)$ 的分量 $f_j(\boldsymbol{x},t)$，$j = 1,2,\cdots,n$，得到

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}f_j}{\mathrm{d}t} = &\left(\frac{\mathrm{d}x_1}{\mathrm{d}t},\frac{\mathrm{d}x_2}{\mathrm{d}t},\cdots,\frac{\mathrm{d}x_n}{\mathrm{d}t},\frac{\mathrm{d}t}{\mathrm{d}t}\right)\left(\frac{\partial f_j}{\partial x_1},\frac{\partial f_j}{\partial x_2},\cdots,\frac{\partial f_j}{\partial x_n},\frac{\partial f_j}{\partial t}\right)^{\mathrm{T}} = \\ &(f_1,f_2,\cdots,f_n,1)\left(\frac{\partial f_j}{\partial x_1},\frac{\partial f_j}{\partial x_2},\cdots,\frac{\partial f_j}{\partial x_n},\frac{\partial f_j}{\partial t}\right)^{\mathrm{T}} = \\ &\boldsymbol{L}f_j\end{aligned} \tag{7.142}$$

式中，$\boldsymbol{L}$ 同式(7.102)。

另外，有

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}^2 f_j}{\mathrm{d}t^2} = &\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\mathrm{d}f_j}{\mathrm{d}t}\right) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\boldsymbol{L}f_j) = \\ &\frac{\mathrm{d}x_1}{\mathrm{d}t}\frac{\partial}{\partial x_1}[\boldsymbol{L}f_j] + \frac{\mathrm{d}x_2}{\mathrm{d}t}\frac{\partial}{\partial x_2}[\boldsymbol{L}f_j] + \cdots + \\ &\frac{\mathrm{d}x_n}{\mathrm{d}t}\frac{\partial}{\partial x_n}[\boldsymbol{L}f_j] + \frac{\partial}{\partial t}[\boldsymbol{L}f_j] = \\ &\left(\frac{\mathrm{d}x_1}{\mathrm{d}t},\frac{\mathrm{d}x_2}{\mathrm{d}t},\cdots,\frac{\mathrm{d}x_n}{\mathrm{d}t},1\right)\left(\frac{\partial}{\partial x_1},\frac{\partial}{\partial x_2},\cdots,\frac{\partial}{\partial x_n},\frac{\partial}{\partial t}\right)^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{L}f_j) = \\ &\boldsymbol{L}^2 f_j\end{aligned}$$

$$\frac{\mathrm{d}^i f_j}{\mathrm{d}t^i} = \boldsymbol{L}^i f_j,\quad i = 0,1,2,\cdots \tag{7.143}$$

但上述只能算出 $t = t_k$ 时刻式(7.143)中的各阶导数值，最后有

$$\frac{\mathrm{d}^j \boldsymbol{f}}{\mathrm{d}t^j}\bigg|_{t=t_{1/2}^k} = \sum_{k=j}^{\infty} \frac{\left(\dfrac{h}{2}\right)^{(k-j)} \mathrm{d}^k \boldsymbol{f}}{(k-j)!\,\mathrm{d}t^k}\bigg|_{t=t_k} \tag{7.144}$$

如果是自治系统，则 $\boldsymbol{L}=\boldsymbol{L}_f$。

用 $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x},t)$ 的李级数展开式式(7.140) 来计算 Magnus 级数的各项 $\overline{\boldsymbol{\Omega}}_k$，并利用多重交换子的线性相关性，最后可得 $\overline{\boldsymbol{\Omega}}_k(k=1,\cdots,6)$ 的表达式如下：

$$
\left.\begin{aligned}
\overline{\boldsymbol{\Omega}}_1 &= h\overline{\boldsymbol{a}}_0+\frac{1}{12}h^3\overline{\boldsymbol{a}}_2+\frac{1}{80}h^5\overline{\boldsymbol{a}}_4+\frac{1}{448}h^7\overline{\boldsymbol{a}}_6+\cdots\\
\overline{\boldsymbol{\Omega}}_2 &= \frac{1}{12}h^3[\overline{\boldsymbol{a}}_0,\overline{\boldsymbol{a}}_1]+h^5\left(\frac{1}{80}[\overline{\boldsymbol{a}}_0,\overline{\boldsymbol{a}}_3]-\frac{1}{240}[\overline{\boldsymbol{a}}_1,\overline{\boldsymbol{a}}_2]\right)+\\
&\quad h^7\left(\frac{1}{448}[\overline{\boldsymbol{a}}_0,\overline{\boldsymbol{a}}_5]-\frac{1}{2\,240}[\overline{\boldsymbol{a}}_1,\overline{\boldsymbol{a}}_4]+\frac{1}{1\,344}[\overline{\boldsymbol{a}}_2,\overline{\boldsymbol{a}}_3]\right)+\cdots\\
\overline{\boldsymbol{\Omega}}_3 &= h^5\left(\frac{1}{360}[\overline{\boldsymbol{a}}_0,\overline{\boldsymbol{a}}_0,\overline{\boldsymbol{a}}_2]-\frac{1}{240}[\overline{\boldsymbol{a}}_1,\overline{\boldsymbol{a}}_0,\overline{\boldsymbol{a}}_1]\right)+\\
&\quad h^7\left(\frac{1}{1\,680}[\overline{\boldsymbol{a}}_0,\overline{\boldsymbol{a}}_0,\overline{\boldsymbol{a}}_4]-\frac{1}{2\,240}[\overline{\boldsymbol{a}}_0,\overline{\boldsymbol{a}}_1,\overline{\boldsymbol{a}}_3]+\right.\\
&\quad \left.\frac{1}{6\,720}[\overline{\boldsymbol{a}}_1,\overline{\boldsymbol{a}}_1,\overline{\boldsymbol{a}}_2]+\frac{1}{6\,048}[\overline{\boldsymbol{a}}_2,\overline{\boldsymbol{a}}_0,\overline{\boldsymbol{a}}_2]-\frac{1}{840}[\overline{\boldsymbol{a}}_3,\overline{\boldsymbol{a}}_0,\overline{\boldsymbol{a}}_1]\right)+\cdots\\
\overline{\boldsymbol{\Omega}}_4 &= -\frac{1}{720}h^5[\overline{\boldsymbol{a}}_0,\overline{\boldsymbol{a}}_0,\overline{\boldsymbol{a}}_0,\overline{\boldsymbol{a}}_1]-h^7\left(\frac{1}{6\,720}[\overline{\boldsymbol{a}}_0,\overline{\boldsymbol{a}}_0,\overline{\boldsymbol{a}}_0,\overline{\boldsymbol{a}}_3]+\right.\\
&\quad \frac{11}{60\,480}[\overline{\boldsymbol{a}}_1,\overline{\boldsymbol{a}}_0,\overline{\boldsymbol{a}}_0,\overline{\boldsymbol{a}}_2]-\frac{1}{7\,560}[\overline{\boldsymbol{a}}_0,\overline{\boldsymbol{a}}_0,\overline{\boldsymbol{a}}_1,\overline{\boldsymbol{a}}_2]+\\
&\quad \left.\frac{1}{4\,032}[\overline{\boldsymbol{a}}_0,\overline{\boldsymbol{a}}_2,\overline{\boldsymbol{a}}_0,\overline{\boldsymbol{a}}_1]-\frac{1}{6\,720}[\overline{\boldsymbol{a}}_1,\overline{\boldsymbol{a}}_1,\overline{\boldsymbol{a}}_0,\overline{\boldsymbol{a}}_1]\right)+\cdots\\
\overline{\boldsymbol{\Omega}}_5 &= h^7\left(\frac{-1}{15\,120}[\overline{\boldsymbol{a}}_0,\overline{\boldsymbol{a}}_0,\overline{\boldsymbol{a}}_0,\overline{\boldsymbol{a}}_0,\overline{\boldsymbol{a}}_2]-\frac{1}{30\,240}[\overline{\boldsymbol{a}}_0,\overline{\boldsymbol{a}}_0,\overline{\boldsymbol{a}}_1,\overline{\boldsymbol{a}}_0,\overline{\boldsymbol{a}}_1]+\right.\\
&\quad \left.\frac{1}{7\,560}[\overline{\boldsymbol{a}}_1,\overline{\boldsymbol{a}}_0,\overline{\boldsymbol{a}}_0,\overline{\boldsymbol{a}}_0,\overline{\boldsymbol{a}}_1]\right)+\cdots\\
\overline{\boldsymbol{\Omega}}_6 &= h^7\,\frac{1}{30\,240}[\overline{\boldsymbol{a}}_0,\overline{\boldsymbol{a}}_0,\overline{\boldsymbol{a}}_0,\overline{\boldsymbol{a}}_0,\overline{\boldsymbol{a}}_0,\overline{\boldsymbol{a}}_1]+\cdots
\end{aligned}\right\}
\tag{7.145}
$$

这里，$[\overline{\boldsymbol{a}}_{i_1},\overline{\boldsymbol{a}}_{i_2},\cdots,\overline{\boldsymbol{a}}_{i_{l-1}},\overline{\boldsymbol{a}}_{i_l}]\equiv[\overline{\boldsymbol{a}}_{i_1},[\overline{\boldsymbol{a}}_{i_2},[\cdots,[\overline{\boldsymbol{a}}_{i_{l-1}},\overline{\boldsymbol{a}}_{i_l}]\cdots]]]$。

现在引入一元积分，即

$$\overline{\boldsymbol{B}}^{(i)}=\frac{1}{h^i}\int_{t_k-h/2}^{t_k+h/2}(t-t_k)^i\boldsymbol{f}\left(\boldsymbol{x},t+\frac{h}{2}\right)\mathrm{d}t,\ i=0,1,2,\cdots \tag{7.146}$$

把式(7.140)中 $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x},t)$ 的李级数展开式代入式(7.146),得

$$\left.\begin{aligned}\overline{\boldsymbol{B}}^{(0)}&=h\overline{\boldsymbol{a}}_0+\frac{1}{12}h^3\overline{\boldsymbol{a}}_2+\frac{1}{80}h^5\overline{\boldsymbol{a}}_4+\frac{1}{448}h^7\overline{\boldsymbol{a}}_6+\cdots\\ \overline{\boldsymbol{B}}^{(1)}&=\frac{1}{12}h^2\overline{\boldsymbol{a}}_1+\frac{1}{80}h^4\overline{\boldsymbol{a}}_3+\frac{1}{448}h^6\overline{\boldsymbol{a}}_5+\frac{1}{2\,304}h^8\overline{\boldsymbol{a}}_7+\cdots\\ \overline{\boldsymbol{B}}^{(2)}&=\frac{1}{12}h\overline{\boldsymbol{a}}_0+\frac{1}{80}h^3\overline{\boldsymbol{a}}_2+\frac{1}{448}h^5\overline{\boldsymbol{a}}_4+\frac{1}{2\,304}h^7\overline{\boldsymbol{a}}_6+\cdots\\ \overline{\boldsymbol{B}}^{(3)}&=\frac{1}{80}h^2\overline{\boldsymbol{a}}_1+\frac{1}{448}h^4\overline{\boldsymbol{a}}_3+\frac{1}{2\,304}h^6\overline{\boldsymbol{a}}_5+\frac{1}{11\,264}h^8\overline{\boldsymbol{a}}_7+\cdots\end{aligned}\right\} \tag{7.147}$$

等等。一般地,$\overline{\boldsymbol{B}}^{(2i)}(-h)=-\overline{\boldsymbol{B}}^{(2i)}(h)$,而 $\overline{\boldsymbol{B}}^{(2i+1)}(-h)=\overline{\boldsymbol{B}}^{(2i+1)}(h)$。通过观察和简单的变换可知,式(7.145)中 $\overline{\boldsymbol{\Omega}}_k(k=1,\cdots,6)$ 可以用 $\overline{\boldsymbol{B}}^{(i)}$ 表示,例如,$\overline{\boldsymbol{\Omega}}_1=\overline{\boldsymbol{B}}^{(0)}$。

那么,可以得到求解非线性动力学方程式(7.1)的如下近似格式:

二阶格式:

$$\boldsymbol{x}(t_{k+1})=\exp(\boldsymbol{L}_{\overline{\boldsymbol{B}}^{(0)}})\boldsymbol{x}(t_k),\ k=0,1,2,\cdots \tag{7.148}$$

四阶格式:

$$\boldsymbol{x}(t_{k+1})=\exp(\boldsymbol{L}_{\overline{\boldsymbol{\Omega}}^{[4]}})\boldsymbol{x}(t_k)=\exp(\boldsymbol{L}_{\overline{\boldsymbol{B}}^{(0)}+[\overline{\boldsymbol{B}}^{(0)},\overline{\boldsymbol{B}}^{(1)}]})\boldsymbol{x}(t_k) \tag{7.149}$$

六阶格式:

$$\boldsymbol{x}(t_{k+1})=\exp(\boldsymbol{L}_{\overline{\boldsymbol{\Omega}}^{[6]}})\boldsymbol{x}(t_k)=\exp(\boldsymbol{L}_{\overline{\boldsymbol{\Omega}}_1+\overline{\boldsymbol{\Omega}}_2+\overline{\boldsymbol{\Omega}}_3+\overline{\boldsymbol{\Omega}}_4})\boldsymbol{x}(t_k) \tag{7.150}$$

式中 $\overline{\boldsymbol{\Omega}}_1=\overline{\boldsymbol{B}}^{(0)}$

$$\overline{\boldsymbol{\Omega}}_2=-\left[\overline{\boldsymbol{B}}^{(1)},\frac{3}{2}\overline{\boldsymbol{B}}^{(0)}-6\overline{\boldsymbol{B}}^{(2)}\right]$$

$$\overline{\boldsymbol{\Omega}}_3+\overline{\boldsymbol{\Omega}}_4=\left[\overline{\boldsymbol{B}}^{(0)},\left[\overline{\boldsymbol{B}}^{(0)},\frac{1}{2}\overline{\boldsymbol{B}}^{(2)}-\frac{1}{60}\overline{\boldsymbol{\Omega}}_2\right]\right]-\frac{3}{5}[\overline{\boldsymbol{B}}^{(0)},\overline{\boldsymbol{\Omega}}_2]$$

八阶格式：

$$\boldsymbol{x}(t_{k+1}) = \exp(\boldsymbol{L}_{\overline{\boldsymbol{\Omega}}^{[8]}})\boldsymbol{x}(t_k) = \exp(\boldsymbol{L}_{\overline{\boldsymbol{\Omega}}_1+\overline{\boldsymbol{\Omega}}_2+\overline{\boldsymbol{\Omega}}_3+\overline{\boldsymbol{\Omega}}_4+\overline{\boldsymbol{\Omega}}_5+\overline{\boldsymbol{\Omega}}_6})\boldsymbol{x}(t_k) \tag{7.151}$$

式中

$$\overline{\boldsymbol{\Omega}}_1 = \overline{\boldsymbol{B}}^{(0)}$$

$$\overline{\boldsymbol{\Omega}}_2 + \overline{\boldsymbol{\Omega}}_3 + \overline{\boldsymbol{\Omega}}_4 + \overline{\boldsymbol{\Omega}}_5 + \overline{\boldsymbol{\Omega}}_6 = \overline{\boldsymbol{Q}}_1 + \overline{\boldsymbol{Q}}_2 + \overline{\boldsymbol{Q}}_3 + \overline{\boldsymbol{Q}}_4 + \overline{\boldsymbol{Q}}_5 + \overline{\boldsymbol{Q}}_6 + \overline{\boldsymbol{Q}}_7$$

式中

$$\overline{\boldsymbol{Q}}_1 = \left[\frac{38}{5}\overline{\boldsymbol{B}}^{(0)} - 24\overline{\boldsymbol{B}}^{(2)}, \overline{\boldsymbol{B}}^{(3)}\right]$$

$$\overline{\boldsymbol{Q}}_2 = \left[\frac{63}{5}\overline{\boldsymbol{B}}^{(0)} - 84\overline{\boldsymbol{B}}^{(2)}, \frac{5}{28}\overline{\boldsymbol{B}}^{(1)} - \overline{\boldsymbol{B}}^{(3)}\right]$$

$$\overline{\boldsymbol{Q}}_3 = \left[\frac{19}{28}\overline{\boldsymbol{B}}^{(0)} - \frac{15}{7}\overline{\boldsymbol{B}}^{(2)}, \left[\overline{\boldsymbol{B}}^{(0)}, \overline{\boldsymbol{B}}^{(2)} + h\left(\frac{61}{588}\overline{\boldsymbol{Q}}_1 - \frac{1}{12}\overline{\boldsymbol{Q}}_2\right)\right]\right]$$

$$\overline{\boldsymbol{Q}}_4 = -\left[\overline{\boldsymbol{B}}^{(3)}, \frac{20}{7}\overline{\boldsymbol{Q}}_1 + 10\overline{\boldsymbol{Q}}_2\right]$$

$$\overline{\boldsymbol{Q}}_5 = \left[-\frac{6\ 025}{4\ 116}\overline{\boldsymbol{B}}^{(0)} + \frac{2\ 875}{343}\overline{\boldsymbol{B}}^{(2)}, [\overline{\boldsymbol{B}}^{(2)}, \overline{\boldsymbol{Q}}_1]\right]$$

$$\overline{\boldsymbol{Q}}_6 = -\left[\overline{\boldsymbol{B}}^{(3)}, \frac{20}{7}(\overline{\boldsymbol{Q}}_3 + \overline{\boldsymbol{Q}}_4) + \frac{820}{189}h\overline{\boldsymbol{Q}}_5\right]$$

$$\overline{\boldsymbol{Q}}_7 = -\frac{1}{42}\left[\overline{\boldsymbol{B}}^{(0)}, \left[\overline{\boldsymbol{Q}}_3 - \frac{1}{3}\overline{\boldsymbol{Q}}_4 + h\overline{\boldsymbol{Q}}_5\right]\right]$$

上述近似格式只须截断 $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x},t)$ 的李级数展开式式(7.140) 及式(7.147) 中的 $\overline{\boldsymbol{B}}^{(i)}$，达到精度要求即可。如果交换子的计算太复杂，可以在二阶近似格式的基础上，根据 Yoshida 技术[15] 构造任意偶数阶近似格式(但是计算量比较大)。

2. 近似解法的时间对称性

不能预知动力学系统的李群性质时，算法的时间对称性是一个非常重要的性质，也就是说，一个算法 $\boldsymbol{x}_h = \boldsymbol{\Psi}(\boldsymbol{x}_0, h, t_0)$，简记为 $\boldsymbol{x}_h = \boldsymbol{\Psi}(h)$，应当保证 $\boldsymbol{\Psi}^{-1}(h) = \boldsymbol{\Psi}(-h)$ 成立。

定理 7.1　式(7.148)，式(7.149)，式(7.150) 及式(7.151) 中的近似格式是时间对称的。

证明 这里只证明近似格式式(7.149)的时间对称性，式(7.148)，式(7.150)和式(7.151)的证明类似。由时间对称性的定义，要证明算法 $\boldsymbol{x}_h = \boldsymbol{\Psi}(\boldsymbol{x}_0, h, t_0)$ 是关于时间对称的，只须证明 $\boldsymbol{x}_0 = \boldsymbol{\Psi}(\boldsymbol{x}_h, -h, t_0 + h)$。由式(7.147)可知，$\overline{\boldsymbol{B}}^{(2i)}(-h) = -\overline{\boldsymbol{B}}^{(2i)}(h)$，$\overline{\boldsymbol{B}}^{(2i+1)}(-h) = \overline{\boldsymbol{B}}^{(2i+1)}(h)$。记 $\overline{\boldsymbol{\Omega}}_k(\boldsymbol{x}_0, t) = \overline{\boldsymbol{\Omega}}_k(\boldsymbol{x}_0, h, t)$，那么

$$\left.\begin{aligned}
&\overline{\boldsymbol{\Omega}}_1(\boldsymbol{x}_0, -h, t) = -\overline{\boldsymbol{\Omega}}_1(\boldsymbol{x}_0, h, t)\\
&\overline{\boldsymbol{\Omega}}_2(\boldsymbol{x}_0, -h, t) = -\overline{\boldsymbol{\Omega}}_2(\boldsymbol{x}_0, h, t)\\
&\overline{\boldsymbol{\Omega}}_3(\boldsymbol{x}_0, -h, t) + \overline{\boldsymbol{\Omega}}_4(\boldsymbol{x}_0, -h, t) =\\
&-(\overline{\boldsymbol{\Omega}}_3(\boldsymbol{x}_0, h, t) + \overline{\boldsymbol{\Omega}}_4(\boldsymbol{x}_0, h, t))
\end{aligned}\right\} \tag{7.152}$$

所以
$$\boldsymbol{L}_{\overline{\boldsymbol{\Omega}}^{[6]}(x_0, -h, t)} = -\boldsymbol{L}_{\overline{\boldsymbol{\Omega}}^{[6]}(x_0, h, t)}$$

记
$$\boldsymbol{x}_h = \exp(\boldsymbol{L}_{\overline{\boldsymbol{\Omega}}^{[6]}(x_0, h, t_0)})\boldsymbol{x}_0 = \boldsymbol{\Psi}(\boldsymbol{x}_0, h, t_0)$$

根据时间对称性的定义，须要证明用同样的方法以 $-h$ 为步长由 $\boldsymbol{x}_h$ 可以返回到初始点 $\boldsymbol{x}_0$，即

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\Psi}(\boldsymbol{x}_h, -h, t_0 + h) &= \exp(\boldsymbol{L}_{\overline{\boldsymbol{\Omega}}^{[6]}(x_h, -h, t_0+h)})\boldsymbol{x}_h = \\
&\exp(-\boldsymbol{L}_{\overline{\boldsymbol{\Omega}}^{[6]}(x_h, h, t_0+h)})\boldsymbol{x}_h = \boldsymbol{\Phi}(\boldsymbol{x}_h)
\end{aligned} \tag{7.153}$$

应用式(7.152)并且注意算子的作用方式，可得

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\Psi}(\boldsymbol{x}_h, -h, t_0 + h) &= \boldsymbol{\Phi}(\boldsymbol{x}_h) = \exp(\boldsymbol{L}_{\overline{\boldsymbol{\Omega}}^{[6]}(x_0, h, t_0)})\boldsymbol{\Phi}(\boldsymbol{x}_0) = \\
&\exp(\boldsymbol{L}_{\overline{\boldsymbol{\Omega}}^{[6]}(x_0, h, t_0)})\exp(-\boldsymbol{L}_{\overline{\boldsymbol{\Omega}}^{[6]}(x_0, h, t_0)})\boldsymbol{x}_0 = \boldsymbol{x}_0
\end{aligned}$$

3. 算例

【例 7.5】 求解如下常微分方程初值问题：

$$x'' = -\frac{x'^2}{1-x}, \quad x(0) = 9, \quad x'(0) = 0.1$$

其精确解为 $x = 1 + 8\exp(t/80)$。可以把它变换为一阶常微分方程组，即

$$\begin{cases}
\dot{x}_1 = x_2, & x_1(0) = 9\\
\dot{x}_2 = -\dfrac{x_2^2}{1-x_1}, & x_2(0) = 0.1
\end{cases}$$

这样，本节的积分公式便可应用，采用二阶格式求解，数值解与精

确解比较所得相对误差示于图 7.12 和图 7.13，其中，Δx_1，Δx_2 分别为 x_1 和 x_2 的相对误差，时间步长取为 $h=0.1$。由图示可见数值结果达到六阶精度。

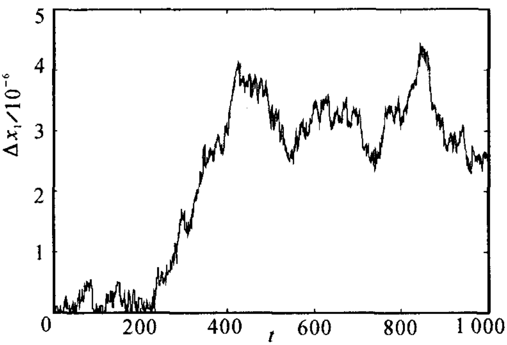


图 7.12　变量 x_1 的相对误差

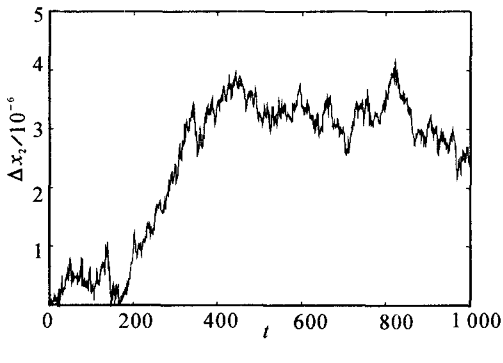


图 7.13　变量 x_2 的相对误差

【例 7.6】　求解 Hamilton 系统初值问题：

$$\begin{cases} \dot{x}_1 = x_2 \\ \dot{x}_2 = x_1 + x_1^2 \\ x_1(0) = -1.2,\ x_2(0) = 0 \end{cases}$$

式中，Hamilton 函数为 $H(x_1,x_2)=-\frac{1}{2}x_1^2+\frac{1}{2}x_2^2-\frac{1}{3}x_1^3$，$-x_1^2+x_2^2-\frac{2}{3}x_1^3=-0.288$ 是它的解曲线，取步长 $h=0.1$，采用二阶近似格式计算，其相轨迹误差 $\Delta Orb=-\tilde{x}_1^2+\tilde{x}_2^2-\frac{2}{3}\tilde{x}_1^3+0.288$，如图 7.14所示，其中 $\tilde{x}_1$，$\tilde{x}_2$ 是数值解。图 7.15 给出了 Hamilton 函数的误差，它们达到了七阶精度(明显优于例 3.2 的结果)。

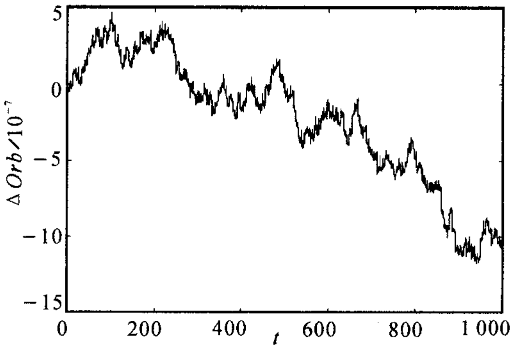


图 7.14　相轨迹的误差

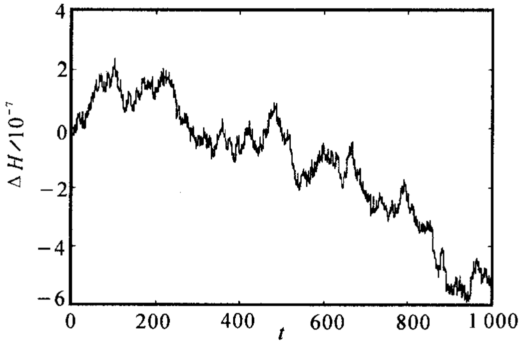


图 7.15　Hamilton 函数的误差

【例 7.7】 Van der Pol 强迫振动的运动方程为

$$\ddot{x} + u(x^2 - 1)\dot{x} + x = f_0\cos\omega t$$

将上面的二阶方程变形为一阶常微分方程组，即

$$\begin{cases}\dot{x}_1 = x_2 \\ \dot{x}_2 = -x_1 - u(x_1^2 - 1)x_2 + f_0\cos\omega t\end{cases}$$

给定参数 $f_0 = 9.0$，$\omega = 3.141\,6$，参数 u 分别取 4.21，7.78，10.99 和 11.16，15.6，16.6，19.4 时，采用四阶近似格式计算，Van der Pol 运动方程分别对应有五周期、七周期、九周期、十一周期、十三周期和十五周期的相曲线，见图 7.16 至图 7.21。参数 u 的变化对系统全局特性的影响见表 7.1。

表 7.1　Van der Pol 方程的全局特性

u	相曲线	u	相曲线
0.00 ～ 0.25	闭环	11.59 ～ 13.15	九周期轨线
0.26 ～ 3.99	三周期轨线	13.16 ～ 13.29	过渡
4.00 ～ 4.20	过渡	13.30 ～ 15.83	十一周期轨线
4.21 ～ 7.35	五周期轨线	15.84 ～ 16.24	过渡
7.36 ～ 7.40	过渡	16.25 ～ 18.48	十三周期轨线
7.41 ～ 10.40	七周期轨线	18.49 ～ 18.80	过渡
10.41 ～ 11.58	过渡	18.81 ～ 21.00	十五周期轨线

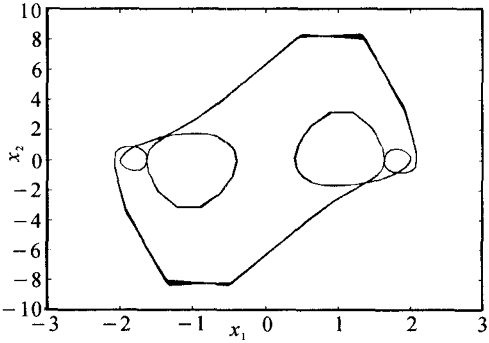


图 7.16　$u = 4.21$ 对应的五周期解

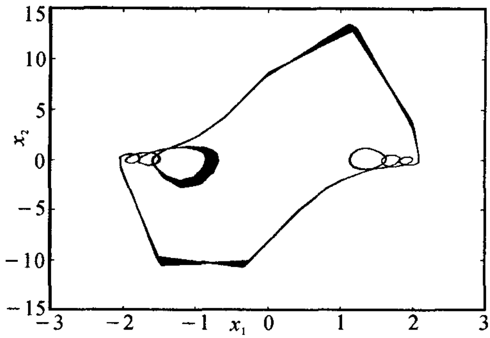


图 7.17　$u = 7.78$ 对应的七周期解

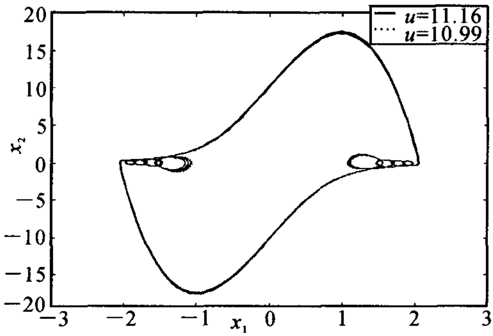


图 7.18　$u = 10.99$ 和 11.16 对应的九周期解

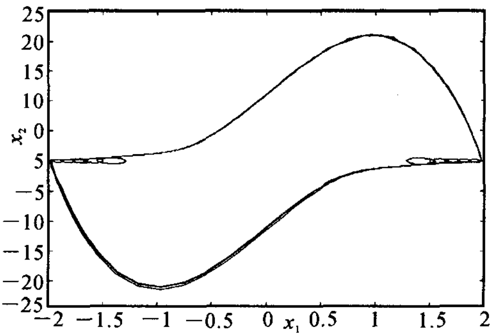


图 7.19　$u = 15.6$ 对应的十一周期解

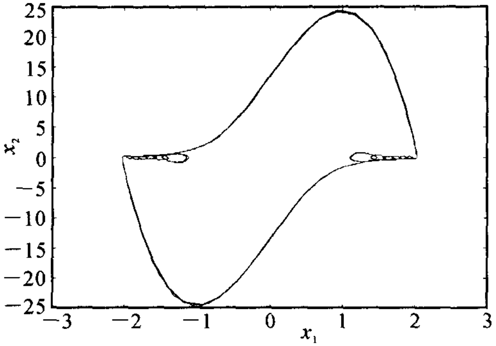


图 7.20　$u = 16.6$ 对应的十三周期解

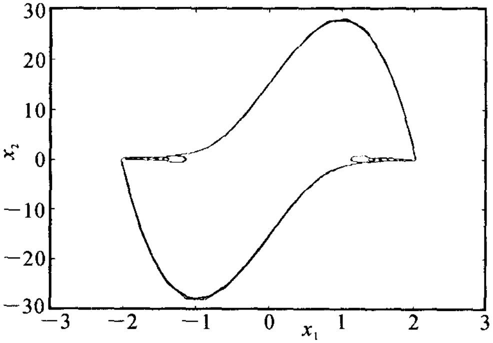


图 7.21　$u = 19.4$ 对应的十五周期解

7.7.5　基于 Magnus 展开式的数值方法的收敛性分析

基于 Magnus 展开式构造 $2n(n>1)$ 阶的积分方法，只须近似计算 Magnus 级数中直到 $\boldsymbol{\Omega}_{2n-2}$ 的各项。本节讨论基于 Magnus 展开式的数值方法的收敛性条件。不妨在 Minkowski 空间讨论微分方程式(7.97) 的 Magnus 级数方法的收敛性。把式(7.99) 代入式(7.100)，可得

$$\widetilde{\boldsymbol{S}}_k^{(j)}(t)=\left[\int_0^t \widetilde{\boldsymbol{A}}(s)\mathrm{d}s,\widetilde{\boldsymbol{S}}_{k-1}^{(j-1)}(t)\right]+$$

$$\sum_{m=2}^{k-j}\sum_{n=1}^{m-1}\frac{B_n}{n!}\left[\int_0^t \widetilde{\boldsymbol{S}}_m^{(n)}(s)\mathrm{d}s,\widetilde{\boldsymbol{S}}_{k-m}^{(j-1)}(t)\right] \tag{7.154}$$

式中，$\widetilde{\boldsymbol{A}}(t)=\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x},t)$，$\widetilde{\boldsymbol{S}}_k^{(j)}(t)=\boldsymbol{S}_k^{(j)}(\boldsymbol{x},t)$。这里假设 $\widetilde{\boldsymbol{A}}(t)$ 是有界的，$\|\widetilde{\boldsymbol{A}}(t)\|$ 是一个逐段光滑函数，且存在 $k(t)$ 使得 $\|\widetilde{\boldsymbol{A}}(t)\|\leqslant k(t)$。记 $K(t)=\int_0^t k(s)\mathrm{d}s$，显然，$\|\boldsymbol{\Omega}_1\|\leqslant K(t)$，由式(7.154)可得

$$\|\widetilde{\boldsymbol{S}}_k^{(j)}(t)\|\leqslant 2K(t)\|\widetilde{\boldsymbol{S}}_{k-1}^{(j-1)}(t)\|+$$

$$2\sum_{m=2}^{k-j}\sum_{n=1}^{m-1}\frac{|B_n|}{n!}\left(\int_0^t\|\widetilde{\boldsymbol{S}}_m^{(n)}(s)\mathrm{d}s\|\right)\|\widetilde{\boldsymbol{S}}_{k-m}^{(j-1)}(t)\|$$

引入记号

$$f_k^{(j)}=2\sum_{m=1}^{k-j}\sum_{n=0}^{m-1}\frac{|B_n|}{n!m}f_m^{(n)}f_{k-m}^{(j-1)} \tag{7.155}$$

式中，$f_1^{(0)}=1$，而对于所有的 $k>1$，$f_k^{(0)}=0$。于是式(7.155)即为

$$\|\widetilde{\boldsymbol{S}}_k^{(j)}(t)\|\leqslant(K(t))^{k-1}k(t)f_k^{(j)} \tag{7.156}$$

如果定义

$$b_k=\frac{1}{k}\sum_{n=1}^{k-1}\frac{B_n}{n!}f_k^{(n)} \tag{7.157}$$

那么，有

$$\|\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}_k(t)\|\leqslant b_k(K(t))^k \tag{7.158}$$

因此，Magnus 级数 $\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}(t)=\sum_{k=1}^{\infty}\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}_k(t)$ 绝对收敛的条件为

$$K(t)\lim_{k\to\infty}\frac{b_{k+1}}{b_k}<1 \tag{7.159}$$

数值求解式(7.159)可得 Magnus 级数解法的收敛条件为

$$K(h)<1.086\,869 \tag{7.160}$$

因此，式(7.160)给出了由 Magnus 级数解法求解非线性动力学问

题的步长 h 应满足的条件。

7.8　基于 Fer 展开式构造非线性动力学方程的近似解法

7.8.1　在 Minkowski 空间进行 Fer 展开

简单说来，Fer 展开式把线性微分方程式(7.7)的解 $\boldsymbol{x}(t)$ 表示为

$$\boldsymbol{x}(t) = \mathrm{e}^{\boldsymbol{F}_1}\mathrm{e}^{\boldsymbol{F}_2}\cdots\mathrm{e}^{\boldsymbol{F}_n}\boldsymbol{x}_n \tag{7.161}$$

式中

$$\boldsymbol{F}_{n+1}(t) = \int_{t_0}^{t}\boldsymbol{A}_n(s)\mathrm{d}s,\ \boldsymbol{A}_0(t) = \boldsymbol{A}(t),\ n = 0,1,2,\cdots \tag{7.162}$$

$$\begin{aligned}\boldsymbol{A}_{n+1} &= \mathrm{e}^{-\boldsymbol{F}_{n+1}}\boldsymbol{A}_n\mathrm{e}^{\boldsymbol{F}_n+1} - \int_0^1\mathrm{d}x\mathrm{e}^{-x\boldsymbol{F}_{n+1}}\boldsymbol{A}_n\mathrm{e}^{x\boldsymbol{F}_{n+1}} = \\ &\int_0^1\mathrm{d}x\int_0^x\mathrm{d}u\mathrm{e}^{-(1-u)\boldsymbol{F}_{n+1}}[\boldsymbol{A}_n,\boldsymbol{F}_{n+1}]\mathrm{e}^{(1-u)\boldsymbol{F}_{n+1}} = \\ &\sum_{j=1}^{\infty}\frac{(-1)^j j}{(j+1)!}[\boldsymbol{F}_{n+1}^j,\boldsymbol{A}_n],\ n = 0,1,2,\cdots\end{aligned} \tag{7.163}$$

式中，交换子 $[\boldsymbol{F}_{n+1}^j,\boldsymbol{A}_n]$ 的概念同式(7.87)，是矩阵或线性算子的交换子。由上述可见，$\boldsymbol{F}_n(n \geqslant 2)$ 包含一个首次项为 $h^{2^{n-1}}$ 的步长 h 的幂级数，如果其中的指数矩阵能够精确计算，文献[27,36]证明了式(7.161)给出的近似解精确到 $h^{2^{n+1}-2}$。

选取适当的数值计算方法近似其中的多元积分即可得到实用的积分格式。例如，选取高斯-拉盖尔积分公式，取节点 $c_1 = \frac{1}{2} - \frac{\sqrt{3}}{6}$，$c_2 = \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{6}$，便可得式(7.7)的一个近似格式为

$$\boldsymbol{x}_{k+1} = \mathrm{e}^{\boldsymbol{F}_1}\mathrm{e}^{\boldsymbol{F}_2}\boldsymbol{x}_k,\quad k = 0,1,2,\cdots \tag{7.164}$$

式中

$$\boldsymbol{F}_1 = \frac{1}{2}h(\boldsymbol{A}_1 + \boldsymbol{A}_2), \quad \boldsymbol{F}_2 = -\frac{\sqrt{3}}{12}h^2[\boldsymbol{A}_1, \boldsymbol{A}_2] \tag{7.165}$$

及

$$\boldsymbol{A}_i = \boldsymbol{A}(t_k + c_i h), \quad i = 1,2 \tag{7.166}$$

对于一般非线性动力学方程式(7.1)，如 7.7 节所述，把它变换为增广动力学系统式(7.97)后，呈现出齐次方程的简单形式。那么在小区间$[t_k, t_{k+1}]$，同式(7.161)一样，增广系统式(7.97)有如下形式的近似解：

$$\boldsymbol{X}_{k+1}(t) = \mathrm{e}^{\widetilde{\boldsymbol{F}}_1}\mathrm{e}^{\widetilde{\boldsymbol{F}}_2}\cdots\mathrm{e}^{\widetilde{\boldsymbol{F}}_n}\boldsymbol{X}_k \tag{7.167}$$

式中

$$\widetilde{\boldsymbol{F}}_{k+1}(t) = \int_{t_0}^{t}\widetilde{\boldsymbol{A}}_n(s)\mathrm{d}s, \ \widetilde{\boldsymbol{A}}_0(t) = \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}, t), \ n = 0,1,2,\cdots \tag{7.168}$$

$$\widetilde{\boldsymbol{A}}_{n+1} = \sum_{j=1}^{\infty}\frac{(-1)^j j}{(j+1)!}[\widetilde{\boldsymbol{F}}_{n+1}^j, \widetilde{\boldsymbol{A}}_n], \ n = 0,1,2,\cdots \tag{7.169}$$

如式(7.164)，有

$$\boldsymbol{X}_{k+1} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{x} \\ \|\boldsymbol{x}\| \end{bmatrix}_{k+1} \approx \mathrm{e}^{\widetilde{\boldsymbol{F}}_1}\mathrm{e}^{\widetilde{\boldsymbol{F}}_2}\boldsymbol{X}_k \tag{7.170}$$

式中

$$\widetilde{\boldsymbol{F}}_1 = \frac{1}{2}h(\widetilde{\boldsymbol{A}}_1 + \widetilde{\boldsymbol{A}}_2), \quad \widetilde{\boldsymbol{F}}_2 = -\frac{\sqrt{3}}{12}h^2[\widetilde{\boldsymbol{A}}_1, \widetilde{\boldsymbol{A}}_2] \tag{7.171}$$

$$\widetilde{\boldsymbol{A}}_i = \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}(t_k + c_i h), t_k + c_i h) = \sum_{j=0}^{\infty}\hat{\boldsymbol{a}}_j(c_i h)^j, \ i = 1,2 \tag{7.172}$$

以及

$$\hat{\boldsymbol{a}}_j = \frac{1}{j!}\frac{\mathrm{d}^j\boldsymbol{A}}{\mathrm{d}t^j}\bigg|_{t=t_k} \tag{7.173}$$

设 A_{ij}，$i,j = 1,2,\cdots,n+1$，是 $\boldsymbol{A}$ 的元素，沿着解曲线 $x_i = x_i(t)$，$i = 1,2,\cdots,n$，类似于李级数展开，有

$$\frac{\mathrm{d}A_{ij}}{\mathrm{d}t}=(f_1,f_2,\cdots,f_n,1)\left(\frac{\partial A_{ij}}{\partial x_1},\frac{\partial A_{ij}}{\partial x_2},\cdots,\frac{\partial A_{ij}}{\partial x_n},\frac{\partial A_{ij}}{\partial t}\right)^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{L}A_{ij}$$

$$\frac{\mathrm{d}^i A_{ij}}{\mathrm{d}t^i}=\boldsymbol{L}^i A_{ij},\quad i=0,1,2,\cdots$$

所以，不难求得式(7.172) 和式(7.171)。所得式(7.170) 是一个三阶近似格式。这里的处理方法与 7.7.3 节的处理方法相同，但仅仅得到三阶精度的近似格式，这是因为 Fer 展开式不具备 Magnus 展开式的对称性质。

7.8.2　基于 Magnus 展开式的 Fer 型近似解

为了简化 Fer 型近似格式的计算，可以充分利用前面基于 Magnus 级数方法的各种数值结果。为此，先假设增广系统式(7.97) 的解为

$$\boldsymbol{X}_{k+1}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}\\ \|\boldsymbol{x}\|\end{bmatrix}_{k+1}\approx \mathrm{e}^{\boldsymbol{W}_1}\mathrm{e}^{\boldsymbol{W}_2}\cdots\boldsymbol{X}_k,\ k=0,1,2,\cdots \tag{7.174}$$

把它与 Magnus 级数方法式(7.98) 联系起来。由式(7.98) 知

$$\boldsymbol{X}_{k+1}=\exp(\boldsymbol{\Omega})\boldsymbol{X}_k \tag{7.175}$$

式中，$\boldsymbol{\Omega}=\sum\limits_{k=1}^{\infty}\boldsymbol{\Omega}_k$。在此，目的是由 Magnus 级数项 $\boldsymbol{\Omega}_k$ 来表示 $\boldsymbol{W}_k(k=1,2,\cdots)$。将式(7.174) 和式(7.175) 等号右端进行比较，可得等式为

$$\mathrm{e}^{\boldsymbol{W}_1}\mathrm{e}^{\boldsymbol{W}_2}\mathrm{e}^{\boldsymbol{W}_3}\cdots=\mathrm{e}^{\boldsymbol{\Omega}_1+\boldsymbol{\Omega}_2+\boldsymbol{\Omega}_3+\cdots} \tag{7.176}$$

根据著名的 BCH 公式，即

$$\mathrm{e}^{\boldsymbol{X}}\mathrm{e}^{\boldsymbol{Y}}=\exp\left(\boldsymbol{X}+\boldsymbol{Y}+\frac{1}{2}[\boldsymbol{X},\boldsymbol{Y}]+\frac{1}{12}[\boldsymbol{X},[\boldsymbol{X},\boldsymbol{Y}]]+\cdots\right) \tag{7.177}$$

来获得式(7.176) 两端步长 h 的同次项，简单计算后不难发现

$$\left.\begin{aligned}&\boldsymbol{W}_1=\boldsymbol{\Omega}_1,\ \boldsymbol{W}_2=\boldsymbol{\Omega}_2,\ \boldsymbol{W}_3=\boldsymbol{\Omega}_3-\frac{1}{2}[\boldsymbol{\Omega}_1,\boldsymbol{\Omega}_2]\\&\boldsymbol{W}_4=\boldsymbol{\Omega}_4-\frac{1}{2}[\boldsymbol{\Omega}_1,\boldsymbol{\Omega}_3]-\frac{1}{6}[\boldsymbol{\Omega}_1,[\boldsymbol{\Omega}_1,\boldsymbol{\Omega}_2]]\cdots\end{aligned}\right\} \tag{7.178}$$

因此，对于增广系统式(7.97)可得 Fer 型近似格式为

$$\boldsymbol{X}_{k+1}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}\\ \|\boldsymbol{x}\|\end{bmatrix}_{k+1}\approx \mathrm{e}^{\boldsymbol{W}_1}\mathrm{e}^{\boldsymbol{W}_2}\cdots\mathrm{e}^{\boldsymbol{W}_n}\boldsymbol{X}_k \tag{7.179}$$

可以采用7.7.2节中的 $\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}_k$ 来近似求解式(7.178)中的 $\boldsymbol{\Omega}_k$，进而给出显式的指数乘积型的近似格式。如果 $\boldsymbol{F}_{n+1}$ 的计算太复杂时，式(7.179)给出了 Fer 展开式的一个很好的替代形式。

7.8.3 关于时间对称的 Fer 型积分格式

算法的时间对称性是一个很重要的性质，它可以减少交换子的计算数量，大大节约计算量。本节构造关于时间对称的 Fer 型积分格式。设增广系统式(7.97)有如下形式的 Fer 型近似格式：

$$\boldsymbol{X}_{k+1}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}\\ \|\boldsymbol{x}\|\end{bmatrix}_{k+1}\approx \mathrm{e}^{\widetilde{\boldsymbol{W}}_1}\mathrm{e}^{\widetilde{\boldsymbol{W}}_2}\cdots\mathrm{e}^{2\widetilde{\boldsymbol{W}}_n}\cdots\mathrm{e}^{\widetilde{\boldsymbol{W}}_2}\mathrm{e}^{\widetilde{\boldsymbol{W}}_1}\boldsymbol{X}_k \tag{7.180}$$

重复应用 BCH 公式，可得

$$\mathrm{e}^{\boldsymbol{X}}\mathrm{e}^{\boldsymbol{Y}}\mathrm{e}^{\boldsymbol{X}}=\exp\Big(2\boldsymbol{X}+\boldsymbol{Y}-\frac{1}{6}[\boldsymbol{X},[\boldsymbol{X},\boldsymbol{Y}]]+\frac{1}{6}[\boldsymbol{Y},[\boldsymbol{Y},\boldsymbol{X}]]+\frac{7}{360}[\boldsymbol{X},[\boldsymbol{X},[\boldsymbol{X},[\boldsymbol{X},\boldsymbol{Y}]]]]+\cdots\Big)$$

根据等式

$$\mathrm{e}^{\widetilde{\boldsymbol{W}}_1}\mathrm{e}^{\widetilde{\boldsymbol{W}}_2}\cdots\mathrm{e}^{2\widetilde{\boldsymbol{W}}_n}\cdots\mathrm{e}^{\widetilde{\boldsymbol{W}}_2}\mathrm{e}^{\widetilde{\boldsymbol{W}}_1}=\mathrm{e}^{\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}_1+\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}_2+\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}_3+\cdots+\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}_n} \tag{7.181}$$

来获得步长 h 的同次项，简单计算后可得

$$\left.\begin{aligned}&\widetilde{\boldsymbol{W}}_1=\frac{1}{2}\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}_1,\ \widetilde{\boldsymbol{W}}_2=\frac{1}{2}\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}_2,\ \widetilde{\boldsymbol{W}}_3=\frac{1}{2}\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}_3\\&\widetilde{\boldsymbol{W}}_4=\frac{1}{2}\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}_4+\frac{1}{48}[\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}_1,[\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}_1,\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}_2]]\cdots\end{aligned}\right\} \tag{7.182}$$

即依然由近似格式式(7.106)至式(7.109)中的 Magnus 级数项 $\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}_k$ 来表示 $\widetilde{\boldsymbol{W}}_n$。

7.8.4 动力学方程的解算子的 Fer 展开式

一般动力学方程 $\dot{x} = f(x,t)$ 都可以表示为式(7.131) 的形式，它的解 $x = \Psi x_0$ 可以通过寻求解算子 Ψ 获得。而且，该解算子满足微分方程式(7.136)，即

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{\Psi} = \boldsymbol{\Psi}\boldsymbol{L}_{f(x_0,t)} \tag{7.183}$$

如果$[\boldsymbol{L}_{f(x_0,t)},\boldsymbol{L}_{f(x_0,s)}] = 0$ 对所有的 t 和 s 恒成立，那么非自治的算子方程式(7.136) 的解为 $\boldsymbol{\Psi} = \exp\left(\int_{t_0}^{t}\boldsymbol{L}_{f(x_0,s)}\mathrm{d}s\right)$。由第二章的李级数解法可知，自治系统属于这种特殊情况。反之，设方程式(7.136) 的解为

$$\boldsymbol{\Psi} = \boldsymbol{\Psi}_1\exp(\boldsymbol{D}^1),\quad \boldsymbol{\Psi}_1(x_0,t_0) = \boldsymbol{I} \tag{7.184}$$

式中，$\boldsymbol{D}^1 = \int_{t_0}^{t}\boldsymbol{L}_{f(x_0,s)}\mathrm{d}s$。记 $\boldsymbol{d}^0 = \boldsymbol{L}_{f(x_0,t)}$，并引入下面的重要公式：

$$\frac{\partial}{\partial t}\exp(\boldsymbol{D}^1) = \int_0^1\exp(s\boldsymbol{D}^1)\dot{\boldsymbol{D}}^1\exp[(1-s)\boldsymbol{D}^1]\mathrm{d}s,$$

$$\dot{\boldsymbol{D}}^1 = \boldsymbol{L}_{f(x_0,t)} = \boldsymbol{d}^0 \tag{7.185}$$

把式(7.184) 代入式(7.183)，即得

$$\begin{aligned}\dot{\boldsymbol{\Psi}} &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}[\boldsymbol{\Psi}_1\exp(\boldsymbol{D}^1)] = \\ &\dot{\boldsymbol{\Psi}}_1\exp(\boldsymbol{D}^1) + \boldsymbol{\Psi}_1\int_0^1\exp(s\boldsymbol{D}^1)\dot{\boldsymbol{D}}^1\exp[(1-s)\boldsymbol{D}^1] = \\ &\boldsymbol{\Psi}_1\exp(\boldsymbol{D}^1)\boldsymbol{d}^0\end{aligned} \tag{7.186}$$

由式(7.186) 中后两式可见

$$\begin{aligned}\dot{\boldsymbol{\Psi}}_1 = &\boldsymbol{\Psi}_1\exp(\boldsymbol{D}^1)\boldsymbol{d}^0\exp[-(\boldsymbol{D}^1)] - \\ &\boldsymbol{\Psi}_1\int_0^1\exp(s\boldsymbol{D}^1)\dot{\boldsymbol{D}}^1\exp[(1-s)\boldsymbol{D}^1]\mathrm{d}s\cdot\exp(-\boldsymbol{D}^1)\end{aligned}$$

记

$$\boldsymbol{d}^1 = \exp(\boldsymbol{D}^1)\boldsymbol{d}^0\exp[-(\boldsymbol{D}^1)] - \int_0^1\exp(s\boldsymbol{D}^1)\dot{\boldsymbol{D}}^1\exp(-s\boldsymbol{D}^1)\mathrm{d}s$$

那么
$$\dot{\boldsymbol{\Psi}}_1 = \boldsymbol{\Psi}_1 \boldsymbol{d}^1 \tag{7.187}$$

重复上面的迭代过程即产生一系列新的算子，n 步以后就为
$$\boldsymbol{\Psi} = \boldsymbol{\Psi}_n \exp(\boldsymbol{D}^n)\exp(\boldsymbol{D}^{n-1})\cdots\exp(\boldsymbol{D}^1) \tag{7.188}$$
$\boldsymbol{\Psi}_n$ 满足如下方程：
$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{\Psi}_n = \boldsymbol{\Psi}_n \boldsymbol{d}^n, \quad \boldsymbol{\Psi}_n(\boldsymbol{x}_0, t_0) = \boldsymbol{I} \tag{7.189}$$
式中
$$\boldsymbol{d}^n = \exp(\boldsymbol{D}^n)\boldsymbol{d}^{n-1}\exp(-\boldsymbol{D}^n) - \int_0^1 \exp(s\boldsymbol{D}^n)\boldsymbol{d}^{n-1}\exp(-s\boldsymbol{D}^n)\mathrm{d}s \tag{7.190}$$
而
$$\boldsymbol{D}^n = \int_{t_0}^{t} \boldsymbol{d}^{n-1}(\boldsymbol{x}, s)\mathrm{d}s, \quad \boldsymbol{d}^0 = \boldsymbol{L}_f \tag{7.191}$$
考虑到公式 $\exp(\boldsymbol{X})\boldsymbol{Y}\exp(-\boldsymbol{X}) = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{k!}[\boldsymbol{X}^k, \boldsymbol{Y}]$，可得 $\boldsymbol{d}^n$ 的另一个表达式为
$$\boldsymbol{d}^n = \sum_{k=1}^{\infty}\frac{k}{(k+1)!}[\boldsymbol{D}^k, \boldsymbol{d}^{n-1}], \ n = 1,2,3,\cdots \tag{7.192}$$

迭代 n 步以后，令 $\boldsymbol{\Psi}_n = \boldsymbol{I}$，$\boldsymbol{\Psi}$ 可近似地表示为
$$\boldsymbol{\Psi} \approx \exp(\boldsymbol{D}^n)\exp(\boldsymbol{D}^{n-1})\cdots\exp(\boldsymbol{D}^1) \tag{7.193}$$
那么，不难得到式(7.1) 及式(7.131) 的 n 阶近似格式为
$$\boldsymbol{x}_{k+1} \approx \exp(\boldsymbol{D}^n)\exp(\boldsymbol{D}^{n-1})\cdots\exp(\boldsymbol{D}^1)\boldsymbol{x}_k, \quad k = 0,1,2,\cdots \tag{7.194}$$

7.8.5 基于 Magnus 展开式的另一类 Fer 型近似格式

对应于方程式(7.131) 的另一类 Fer 型近似格式为
$$\boldsymbol{x}_{k+1} \approx \mathrm{e}^{\boldsymbol{L}\overline{\boldsymbol{W}}_n}\mathrm{e}^{\boldsymbol{L}\overline{\boldsymbol{W}}_{n-1}}\cdots\mathrm{e}^{\boldsymbol{L}\overline{\boldsymbol{W}}_2}\mathrm{e}^{\boldsymbol{L}\overline{\boldsymbol{W}}_1}\boldsymbol{x}_k \tag{7.195}$$
式中
$$\left.\begin{aligned}
&\overline{\boldsymbol{W}}_1 = \overline{\boldsymbol{\Omega}}_1, \ \overline{\boldsymbol{W}}_2 = \overline{\boldsymbol{\Omega}}_2, \ \overline{\boldsymbol{W}}_3 = \overline{\boldsymbol{\Omega}}_3 + \frac{1}{2}[\overline{\boldsymbol{\Omega}}_1, \overline{\boldsymbol{\Omega}}_2] \\
&\overline{\boldsymbol{W}}_4 = \overline{\boldsymbol{\Omega}}_4 + \frac{1}{2}[\overline{\boldsymbol{\Omega}}_1, \overline{\boldsymbol{\Omega}}_3] - \frac{1}{6}[\overline{\boldsymbol{\Omega}}_1, [\overline{\boldsymbol{\Omega}}_1, \overline{\boldsymbol{\Omega}}_2]], \cdots
\end{aligned}\right\} \tag{7.196}$$

也就是说，可以采用 7.7.4 节的式(7.145) 来计算 $\boldsymbol{\Omega}_k$ 的近似值 $\overline{\boldsymbol{\Omega}}_k$，进而可以给出显式的指数乘积型的近似格式。

与近似格式(7.180) 类似，关于时间对称的另一类 Fer 型积分格式为

$$\boldsymbol{x}_{k+1} \approx \mathrm{e}^{L_{\hat{W}_1}} \mathrm{e}^{L_{\hat{W}_2}} \cdots \mathrm{e}^{L_{2\hat{W}_n}} \cdots \mathrm{e}^{L_{\hat{W}_2}} \mathrm{e}^{L_{\hat{W}_1}} \boldsymbol{x}_k \tag{7.197}$$

式中

$$\left.\begin{aligned} \hat{W}_1 &= \frac{1}{2}\overline{\boldsymbol{\Omega}}_1,\ \hat{W}_2 = \frac{1}{2}\overline{\boldsymbol{\Omega}}_2,\ \hat{W}_3 = \frac{1}{2}\overline{\boldsymbol{\Omega}}_3 \\ \hat{W}_4 &= \frac{1}{2}\overline{\boldsymbol{\Omega}}_4 + \frac{1}{48}[\overline{\boldsymbol{\Omega}}_1,[\overline{\boldsymbol{\Omega}}_1,\overline{\boldsymbol{\Omega}}_2]],\cdots \end{aligned}\right\} \tag{7.198}$$

这里，$\overline{\boldsymbol{\Omega}}_k$ 仍然是式(7.145) 中 Magnus 级数项的近似值。

7.8.6　基于 Fer 展开的数值方法的收敛性分析

不妨研究数值方法即式(7.167) 的收敛性，也就是要讨论式(7.97) 中 $\boldsymbol{A}$ 在什么条件下能保证式(7.167) 中 $\widetilde{\boldsymbol{F}}_n \to 0$(当 $n \to \infty$)。记 $\widetilde{\boldsymbol{A}}(t) = \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x},t)$，并假设 $\widetilde{\boldsymbol{A}}(t)$ 是有界的，$\|\widetilde{\boldsymbol{A}}(t)\|$ 是一个逐段光滑函数，且存在 $k(t)$，使得 $\|\widetilde{\boldsymbol{A}}(t)\| \leqslant k(t) \equiv k_0(t)$。设式(7.168) 及式(7.169) 中的 $\|\widetilde{\boldsymbol{A}}_n(t)\| \leqslant k_n(t)$，并记 $K_n(t) = \int_{t_0}^t k_n(s)\mathrm{d}s$，显然，式(7.169) 给出某种迭代关系，即

$$k_{n+1} = f(k_n, K_n) \tag{7.199}$$

积分后得

$$K_{n+1} = M(K_n) \tag{7.200}$$

那么，现在的问题变成：在什么条件下，当 $n \to \infty$ 时，$K_n \to 0$。如果 0 是映射 M 的一个稳定不动点，且 K_0 在该稳定不动点的吸引盆内，则当 $n \to \infty$ 时，$K_n \to 0$。为此，求解方程 $\xi = M(\xi)$ 来寻求它的下一个不动点，便可得到所求。将式(7.169) 的两边取范数，有

$$\|\widetilde{\boldsymbol{A}}_{n+1}\| \leqslant \int_0^1 \mathrm{d}x \int_0^x \mathrm{d}u \mathrm{e}^{2(1-u)K_n} \|[\widetilde{\boldsymbol{A}}_n, \widetilde{\boldsymbol{F}}_{n+1}]\| \tag{7.201}$$

用 k_n 来表示，它又可以写成

$$k_{n+1} = \frac{1 - e^{2K_n}(1 - 2K_n)}{2K_n} \frac{dK_n}{dt} \tag{7.202}$$

因此，式(7.200) 中的映射 M 即为

$$M(K_n) = \int_0^{K_n} \frac{1 - e^{2x}(1 - 2x)}{2x} dx \tag{7.203}$$

显然，$\xi = 0$ 是 M 的一个稳定的不动点，另一个不动点为 $\xi = 0.860\,406\,5$，但它是不稳定的。因此，可以得出结论，Fer 型积分格式的步长应满足如下条件：

$$\int_0^h \| \widetilde{\boldsymbol{A}}(s) \| \, ds = \int_0^h \| \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}, s) \| \, ds \leqslant K_0(h) < 0.860\,406\,5 \tag{7.204}$$

才能保证其有效性。

7.8.7 算例

【例 7.8】 求解例 7.3 的非线性周期系统的响应问题。取步长 $h = 0.1$，采用四阶的时间对称的近似格式式(7.180)，数值解与精确解比较所得误差见图 7.22 和图 7.23，其中 Δx_1，Δx_2 分别是 x_1 和 x_2 的误差。

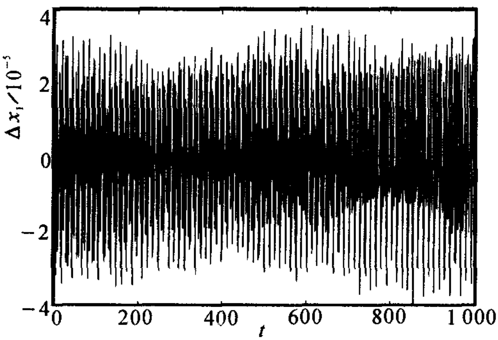


图 7.22 变量 x_1 的误差

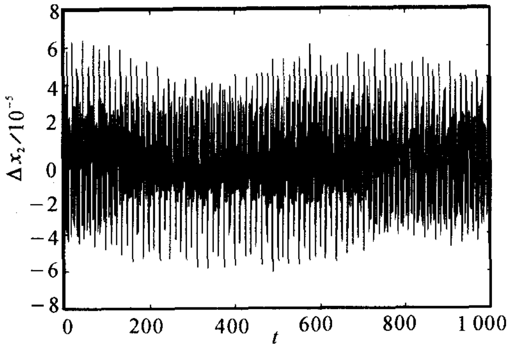


图 7.23　变量 x_2 的误差

【例 7.9】　求解受迫 Van der Pol 方程：

$$\begin{bmatrix}\dot{x}_1\\ \dot{x}_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0 & \alpha\\ -\alpha & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\ x_2\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}0\\ \varepsilon(1-x_1^2)x_2+f_0\cos\omega t\end{bmatrix}$$

式中，α 及 ε 是物理参数，f_0 是频率为 ω 的外部激励的振幅。根据式(7.97) 它可表示为

$$\begin{bmatrix}\dot{x}_1\\ \dot{x}_2\\ \dfrac{\mathrm{d}\|\boldsymbol{x}\|}{\mathrm{d}t}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0 & \alpha & 0\\ -\alpha & 0 & \dfrac{\varepsilon(1-x_1^2)x_2+f_0\cos(\omega t)}{\sqrt{x_1^2+x_2^2}}\\ 0 & \dfrac{\varepsilon(1-x_1^2)x_2+f_0\cos(\omega t)}{\sqrt{x_1^2+x_2^2}} & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\ x_2\\ \|\boldsymbol{x}\|\end{bmatrix}$$

取 $\alpha=1$，$\varepsilon=1$，$\omega=1.2$，振幅为 $f_0=5$，采用式(7.167) 的二阶 Fer 展开近似格式，其数值解产生的轨线如图 7.24 所示，图中没有画出始于初始点 $x_1=2$ 及 $x_2=0$ 的暂态轨线部分(时间步长 $h=0.1$)。同时给出了由四阶 Runge-Kutta 方法得到的相曲线，二者几乎是重合的。

【例 7.10】　求解例 7.2 的初值问题。取时间步长 $h=0.1$，采用式(7.194) 的二阶 Fer 展开近似格式，数值解曲线与精确解曲线

的比较如图 7.25 所示，它们几乎是重合的。

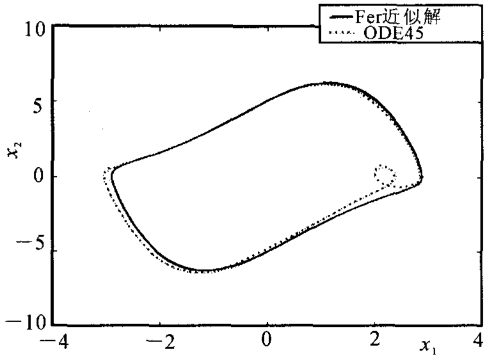


图 7.24　R-K 近似解与本节数值解所得相曲线比较

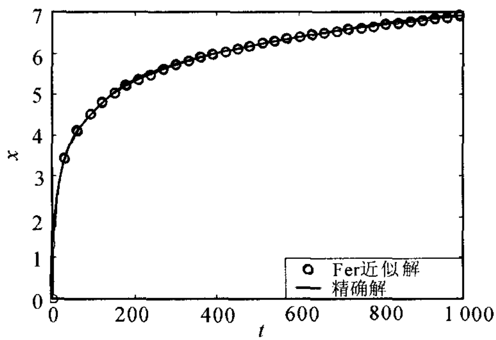


图 7.25　数值解及精确解曲线的比较

7.9　本章小结

本章分别从线性算子作用的观点和拓广动力学系统构形空间的观点两个方面，讨论了用 Magnus 和 Fer 展开式求解非线性动力学系统的新方法。Magnus 级数包含了大量的交换子运算，利用函数的李级数展开技巧和 Magnus 级数的对称性质，算法设计

中涉及最少数目的交换子的计算，给出了分别包含 1 个、4 个和 10 个交换子的四阶、六阶和八阶近似格式。而且基于 Magnus 展开式的算法是关于时间对称的，书中给出了证明。基于 Fer 展开式的算法设计较为麻烦，但截断前几项就能达到很好的计算效果。本章把 Magnus 和 Fer 展开方法有机地联系起来，基于 Magnus 级数方法的各种结果，方便地构造了高阶的显式 Fer 型积分格式。但是基于 Fer 展开的算法不是对称的。本章进一步基于 Magnus 展开式构造了关于时间对称的 Fer 型积分格式。

书中提供的诸多算例验证了所述方法的有效性及足够的精确性。计算了受迫 Van der Pol 方程及非线性单摆的振动问题，计算结果显示，该方法在保持系统守恒量等定性性质方面具有明显优势。并能非常有效地展示出非线性动力学系统丰富复杂的周期、倍周期运动和混沌等非线性特性。另外，数值算例还显示书中方法对于自治系统更加精确、有效，二阶方法能达到四阶甚至六阶以上的计算精度，而且可以采用大步长进行计算。这主要在于应用 Magnus 展开式的时间平均思想和李级数展开方法对自治系统隐含时间问题的有效处理。

根据 Magnus 和 Fer 展开式的基本理论，书中积分方法是一族几何积分法，能保持原动力学系统的许多定性性质，可以用于求解一般动力学系统。

参考文献

1 Ruth R. A canonical integration technique. IEEE Trans. Nucl. Sci., 1983, 30: 2 669～2 674

2 Candy J, Rozmus W. A symplectic integration algorithm for separable Hamiltonian functions. J. Comput. Phys., 1991, 92: 230～256

3 Suzuki M. Fractal decomposition of exponential operators with applications to many-body theories and Monte Carlo simulations. Phys. Lett.

A, 1990, 146: 319～331

4 Wisdom J, Holman M. Symplectic maps for the N-body problem, Astron. J., 1991, 102: 1 528～1 539

5 Gray S, Manolopoulos D E. Symplectic integrators tailored to the time-dependent Schroedinger equation. J. Chem. Phys., 1996, 104: 7 099～7 108

6 Leforestier C, Bisseling R H, Cerjan C, Feit M D, Friesner R, Guldberg A, Hammerich A, Jolicard G, Karrlein W, Meyer H D, Lipkin N, Roncero O, Kosloff R. A comparison of different propagation schemes for the time dependent Schroedinger equation. J. Comput. Phys., 1991, 94: 59～80

7 Cary J R, Doxas J. An explicit symplectic integration scheme for plasma simulations. J. Comput. Phys., 1993, 107: 98～104

8 Barth E, Leimkuhler B. Symplectic methods for conservative multibody systems. Tech. Report KITCS93-12-1, KITCs, Univ. of Kansas, Lawrence, 1993

9 Reich S. Smoothed langevin dynamics of highly oscillatory systems, Tech. Report SC 96-104, Konrad-Zuse-Zentrum, Berlin, Germany, 1996

10 Zhuang G, Schlick T. The Langevin/implicit-Euler/normal-mode scheme for molecular dynamics at large time steps. J. Chem. Phys., 1994, 101: 4 995～5 012

11 Andersen H C. Rattle: A velocity version of the Shake algorithm for mplecular dynamics calculations. J. Comput. Phys., 1983, 52: 24～34

12 Zhong G, Scovel C. Hamiltonian truncation of shallow water equation, Tech. Report LA-UR-93-1611, Los Alamos National Lab., Los Alamos, NM, 1993

13 Blanes S, Cacas F, Oteo J A, Ros J. Magnus and Fer expansion for matrix differential equations: the convergence problem. J. Phys. A: Math. Gen. 1998, 31: 259～268

14 Arnold V I. Mathematical method of classical-mechanics. 2nd ed. New York: Springer-Verlag, 1989

15 Yoshida H. Construction of higher order symplectic integrators. Physics Letters A, 1990, 150: 262～268

16 Liu C S. Cone of non-linear dynamical system and group preserving schemes. International Journal of Non-linear Mechanics, 2001, 36: 1 047～1 068

17 Hong H K, Liu C S. Some physical models with Minkowski spacetime structure and Lorentz group symmetry. International Journal of Non-linear Mechanics, 2001, 36:1 075～1 084

18 Dieci L, Russell R D, Van Vleck E S. Unitary integrators and applications to continuous othonormalization techniques. SIAM J. Numer. Anal. 1994, 31: 261～281

19 Wilcox R M. Exponential operators and parameter differentiation in quantum physics. J. Math. Phys., 1967, 8: 962～982

20 Sanz-Serna J M. Symplectic integrators for Hamiltonian problems: An overview. Acta. Numerica, 1992, 1: 243～286

21 Cacas F. Fer's factorization as a symplectic integrator. Numer. Math., 1996, 74(3): 283～303

22 Cacas F, Oteo J A, Ros J. Lie algebraic approach to Fer's expansion for classical Hamiltonian systems. J. Phys. A: Math. Gen., 1991, 24 (17): 4 037～4 041

23 Klarsfeld S, Oteo J A. Exponential infinite-product representations of the time-displacement operator. J. Phys. A: Math. Gen., 1989, 22: 2 687～2 694

24 Magnus W. On the exponential solution of differential equations for a linear operator. Commun. Pure Appl. Math. 1954, 7: 649～673

25 Munthe-kaas H, Owren B. Computations in a free Lie algebra. Phil. Trans. R. Soc. Lond. A, 1999, 357: 957～981

26 Klarsfeld S, Oteo J A. Recursive generation of higher-order terms in the Magnus expansion. Phys. Rev. A, 1989, 39: 3 270～3 273

27 Fer F. Résolution de l'equation matricielle $\dot{U}=pU$ par produit infini d' exponentielles matricielles. Bull. Classes Sci. Acad. Roy. Bel., 1958,

44：818～829

28 Blanes S，Cacas F，Ros J. Improved high order integrators based on the Magnus expansion. BIT，2000，40(3)：434～450

29 Iserles A，Nφrsett S P. On the solution of linear differential equations in Lie groups. Phil. Trans. R. Soc.，Lond. A，1999，357：983～1 019

30 Blanes S，Moan P C. Splitting methods for non-autonomous Hamiltonian equations，J. Comput. Phys.，2001，170(1)：205～230

31 Blanes S，Cacas F，Ros J. High order optimized geometric integrators for linear differential equations. BIT，2002，42(2)：262～284

32 Zanna A. Collocation and relaxed collocation for the Fer and the Magnus expansions. SIAM J. Numer. Anal.，1999，36：1 145～1 182

33 Klarsfeld S，Oteo J A. Recursive generation of higher-order terms in the Magnus expansion. Phys. Rev. A，1989，39：3 270～3 273

34 Zanna A. The Fer expansion and time-symmetry：A Strang-type approach. Appl. Numer. Math.，2001，39：435～459

35 Munthe-kaas H，Owren B. Computations in a free Lie algebra. Phil. Trans. R. Soc. Lond. A，1999，357：957～981

36 Iserles A. Solving linear ordinary differential equations by exponentials of iterated commutators. Numer. Math.，1984，45：183～199

第八章　基于 RKMK 方法构造一般非线性动力学方程的数值解法

8.1　引　言

流形提供了动力学微方程发展的抽象定义域,李代数给出了动力学方程所定义运动的结构。人们日益重视流形上微分方程的数值求解问题,其主要目的在于数值方法的设计要足以保证数值解在解析解发展的流形之上。为此,很多学者都进行了研究[1~6],尽管早在19世纪末、20世纪初这些数值方法赖以发展的基本结果已经存在,然而直到近几年人们才研究了实用的数值算法。RKMK 方法[7] 是求解构性空间在一个微分流形(或李群)上的微分方程的一种推广的 Runge-Kutta 方法[9~11]。其主要思想是把李群上展开的微分方程变换为与之相应的李代数上展开的等价微分方程。李代数是矢量空间(线性空间),因此,经典的 Runge-Kutta 方法就可以用于近似求解变换后的微分方程。在李代数上求解等价的微分方程后,所得数值解由指数映射拉回到李群便可得到原微分方程的数值解。特别地,Munthe-Kaas 在文献[8] 中通过引入校正函数,给出了显式的积分方法,它能保证所得的数值解在正确的微分流形上进行迭代。

基于上述研究成果,本章进一步讨论一般非线性动力学方程式(7.1) 的求解问题,它是科学模拟物理过程的重要工具。如第七章所述,在 Minkowski 空间 M^{n+1} 式(7.1) 可以转化为增广的动力

学系统式(7.20),即成为便于操作的李型方程$\dot{\boldsymbol{X}}=\boldsymbol{A}\boldsymbol{X}, \boldsymbol{X}\in M^{n+1}$。而且自然呈现出一般动力学系统在 Minkowski 空间的零锥结构[12~13],在此基础上构造 RKMK 型的积分方法。其中,在李代数上求得的数值解须拉回到相应的李群方能得到原微分方程的数值解,这时指数矩阵的计算精度是非常重要的,这里采用精细积分法[14~15]来解决这个问题。

另外,为了进一步说明所讨论的李群积分方法的优越性,本章简单介绍李群方法的向后误差分析性质。向后误差分析是研究数值方法的长期行为的一个重要工具[16~19],同时可以用于数值方法的稳定性分析,另外它还可用于讨论几何积分方法所特有的定性性质[20]。

8.2 李群上微分方程的 RKMK 方法

对于矩阵李群上微分方程初值问题:

$$\dot{\boldsymbol{y}}=\widetilde{\boldsymbol{F}}(\boldsymbol{y})\boldsymbol{y},\ \boldsymbol{y}_0=\boldsymbol{p},\ \text{其中}\ \widetilde{\boldsymbol{F}}: G\rightarrow g \tag{8.1}$$

通过引入适当的校正函数,并选取一个三阶显式 Runge-Kutta 方法的系数 $a_{i,j}$ 和 b_j,则一个三阶的显式 RKMK 格式如下:

$$
\begin{aligned}
&\boldsymbol{y}_0=\boldsymbol{p}\\
&\text{for}\quad n=0,1,2,\cdots\\
&\qquad \boldsymbol{I}_1=\boldsymbol{k}_1=\widetilde{\boldsymbol{F}}(\boldsymbol{y}_n)\\
&\qquad \text{for}\quad i=2,\cdots,s\\
&\qquad\qquad \boldsymbol{u}_i=h\sum_{j=1}^{i-1}a_{i,j}\boldsymbol{k}_j\\
&\qquad\qquad \boldsymbol{k}_i=\widetilde{\boldsymbol{F}}(\exp(\boldsymbol{u}_i)\boldsymbol{y}_n) \qquad\qquad (8.2)\\
&\qquad \text{end}\\
&\qquad \boldsymbol{v}=h\sum_{j=1}^{s}b_j\boldsymbol{k}_j
\end{aligned}
$$

$$\hat{\boldsymbol{v}} = \boldsymbol{v} + \frac{h}{6}[\boldsymbol{v}, \boldsymbol{I}_1]$$

$$\boldsymbol{y}_{n+1} = \exp(\hat{\boldsymbol{v}})\boldsymbol{y}_n$$

end

选取四阶显式 Runge-Kutta 法的系数 $a_{i,j}$ 及 b_j，令 $c_i = \sum_{j=1}^{s} a_{i,j}, d_i = \sum_{j=1}^{s} a_{i,j}c_j$。通过求解线性方程来计算系数 $m_i(i=1,2,3)$，即

$$\begin{bmatrix} c_2 & c_3 & c_4 \\ c_2^2 & c_3^2 & c_4^2 \\ 2d_2 & 2d_3 & 2d_4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} m_1 \\ m_2 \\ m_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{8.3}$$

那么，一个四阶的 RKMK 格式为

$$\boldsymbol{y}_0 = \boldsymbol{p}$$

for　$n = 0, 1, 2, \cdots$

$$\boldsymbol{I}_1 = \boldsymbol{k}_1 = \widetilde{\boldsymbol{F}}(\boldsymbol{y}_n)$$

for　$i = 2, \cdots, s$

$$\boldsymbol{u}_i = h\sum_{j=1}^{i-1} a_{i,j}\boldsymbol{k}_j$$

$$\hat{\boldsymbol{u}}_i = \boldsymbol{u}_i + \frac{c_i h}{6}[\boldsymbol{u}_i, \boldsymbol{I}_1]$$

$$\boldsymbol{k}_i = \boldsymbol{F}(\exp(\hat{\boldsymbol{u}}_i)\boldsymbol{y}_n) \tag{8.4}$$

end

$$\boldsymbol{I}_2 = (m_1(\boldsymbol{k}_2 - \boldsymbol{I}_1) + m_2(\boldsymbol{k}_3 - \boldsymbol{I}_1) + m_3(\boldsymbol{k}_4 - \boldsymbol{I}_1))/h$$

$$\boldsymbol{v} = h\sum_{j=1}^{s} b_j\boldsymbol{k}_j$$

$$\hat{\boldsymbol{v}} = \boldsymbol{v} + \frac{h}{4}[\boldsymbol{v}, \boldsymbol{I}_1] + \frac{h^2}{24}[\boldsymbol{v}, \boldsymbol{I}_2]$$

$$\boldsymbol{y}_{n+1} = \exp(\hat{\boldsymbol{v}})\boldsymbol{y}_n$$

end

8.3 一般非线性动力学系统的李群算法

同第七章一样，非线性的动力学系统式(7.1)转化为Minkowski空间M^{n+1}上的增广动力学系统式(7.20)后，自然呈现出一个零锥结构：$\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g}\boldsymbol{X}=0$。算法的设计应当保证系统的这个对称性质，RKMK型积分方法能做到这一点。本节基于RKMK方法来构造式(7.20)及式(7.1)的数值解法。记$\boldsymbol{X}_n=\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}(t_n)\\ \|\boldsymbol{x}(t_n)\|\end{bmatrix}$，其中$t_n=t_0+nh$，$n=0,1,2,\cdots$，那么根据8.2节的方法，对应于经典的二阶、三阶、四阶Runge-Kutta法，得到如下RKMK型的近似格式(注意其中的$\boldsymbol{A}$同式(7.20)中的$\boldsymbol{A}$)。

二阶格式：

$$\left.\begin{aligned}&\boldsymbol{X}_0=\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}_0\\ \|\boldsymbol{x}_0\|\end{bmatrix}\\ &\text{for}\quad n=0,1,2,\cdots\\ &\qquad \boldsymbol{k}_1=\boldsymbol{A}(\boldsymbol{X}_n,t_n)\\ &\qquad \boldsymbol{k}_2=\boldsymbol{A}\left(\exp\left(\frac{1}{2}h\boldsymbol{k}_1\right)\boldsymbol{X}_n,t_n+\frac{1}{2}h\right)\\ &\qquad \boldsymbol{X}_{n+1}=\exp(h\boldsymbol{k}_2)\boldsymbol{X}_n\\ &\text{end}\end{aligned}\right\}\tag{8.5}$$

三阶格式：

$$\left.\begin{aligned}&\text{for}\quad n=0,1,2,\cdots\\ &\qquad \boldsymbol{k}_1=\boldsymbol{A}(\boldsymbol{X}_n,t_n)\\ &\qquad \boldsymbol{k}_2=\boldsymbol{A}\left(\exp\left(\frac{1}{2}h\boldsymbol{k}_1\right)\boldsymbol{X}_n,t_n+\frac{1}{2}h\right)\\ &\qquad \boldsymbol{k}_3=\boldsymbol{A}(\exp(-h\boldsymbol{k}_1+2h\boldsymbol{k}_2)\boldsymbol{X}_n,t_{n+1})\\ &\qquad \boldsymbol{u}=h\left(\frac{1}{6}\boldsymbol{k}_1+\frac{2}{3}\boldsymbol{k}_2+\frac{1}{6}\boldsymbol{k}_3\right)\end{aligned}\right\}\tag{8.6}$$

$$\boldsymbol{X}_{n+1} = \exp\left(\boldsymbol{u} + \frac{1}{6}h[\boldsymbol{u},\boldsymbol{k}_1]\right)\boldsymbol{X}_n$$

end

四阶格式：

$$\left.\begin{aligned}
&\text{for}\quad n = 0,1,2,\cdots\\
&\quad \boldsymbol{I}_1 = \boldsymbol{k}_1 = \boldsymbol{A}(\boldsymbol{X}_n, t_n)\\
&\quad \boldsymbol{k}_2 = \boldsymbol{A}\left(\exp\left(\frac{1}{2}h\boldsymbol{k}_1\right)\boldsymbol{X}_n, t_n + \frac{1}{2}h\right)\\
&\quad \boldsymbol{k}_3 = \boldsymbol{A}\left(\exp\left(\frac{1}{2}h\boldsymbol{k}_2 + \frac{1}{24}h^2[\boldsymbol{k}_2,\boldsymbol{I}_1]\right)\boldsymbol{X}_n, t_n + \frac{1}{2}h\right)\\
&\quad \boldsymbol{k}_4 = \boldsymbol{A}\left(\exp\left(h\boldsymbol{k}_3 + \frac{1}{6}h^2[\boldsymbol{k}_3,\boldsymbol{I}_1]\right)\boldsymbol{X}_n, t_{n+1}\right)\\
&\quad \boldsymbol{I}_2 = [2(\boldsymbol{k}_2 - \boldsymbol{I}_1) + 2(\boldsymbol{k}_3 - \boldsymbol{I}_1) - (\boldsymbol{k}_4 - \boldsymbol{I}_1)]/h\\
&\quad \boldsymbol{u} = h\left(\frac{1}{6}\boldsymbol{k}_1 + \frac{1}{3}\boldsymbol{k}_2 + \frac{1}{3}\boldsymbol{k}_3 + \frac{1}{6}\boldsymbol{k}_4\right)\\
&\quad \boldsymbol{X}_{n+1} = \exp\left(\boldsymbol{u} + \frac{1}{4}h[\boldsymbol{u},\boldsymbol{I}_1] + \frac{1}{24}h^2[\boldsymbol{u},\boldsymbol{I}_2]\right)\boldsymbol{X}_n\\
&\text{end}
\end{aligned}\right\} \tag{8.7}$$

其中，指数矩阵 $\exp(h\boldsymbol{k}_1)$ 等可以采用精细积分方法来计算。即

$$\exp(h\boldsymbol{k}_1) = [\exp(\boldsymbol{k}_1 \cdot h/m)]^m \tag{8.8}$$

取 $m = 2^L$，例如 $L = 20$，那么 $m = 1\ 048\ 576$。令 $\Delta t = h/m$，则

$$\exp(\Delta t \cdot \boldsymbol{k}_1) \approx \boldsymbol{I} + \boldsymbol{k}_1 \cdot \Delta t + (\boldsymbol{k}_1 \cdot \Delta t)^2/2 = \boldsymbol{I} + \boldsymbol{T}_a \tag{8.9}$$

式中

$$\boldsymbol{T}_a = \boldsymbol{k}_1 \cdot \Delta t + (\boldsymbol{k}_1 \cdot \Delta t)^2/2 \tag{8.10}$$

因为

$$\exp(h\boldsymbol{k}_1) = [\boldsymbol{I} + \boldsymbol{T}_a]^{2^L} = [\boldsymbol{I} + \boldsymbol{T}_a]^{2^{L-1}} \times [\boldsymbol{I} + \boldsymbol{T}_a]^{2^{L-1}} \tag{8.11}$$

可以执行如下循环语句来计算 $\boldsymbol{T}_a$：

for (iter = 0; iter < L; iter ++)

$$\boldsymbol{T}_a = 2 \times \boldsymbol{T}_a + \boldsymbol{T}_a \times \boldsymbol{T}_a \tag{8.12}$$

循环结束时，得到

$$\exp(h\boldsymbol{k}_1) = \boldsymbol{I} + \boldsymbol{T}_a \tag{8.13}$$

现在简单说明本节方法保持增广的动力学系统的零锥结构，不妨讨论四阶格式式(8.7)。记

$$\boldsymbol{S} = \exp\left(\boldsymbol{u} + \frac{1}{4}h[\boldsymbol{u},\boldsymbol{I}_1] + \frac{1}{24}h^2[\boldsymbol{u},\boldsymbol{I}_2]\right)$$

那么近似地有

$$\boldsymbol{S}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g}\boldsymbol{S} = \boldsymbol{g} \quad （算法的保群性质） \tag{8.14}$$

所以

$$\boldsymbol{X}_{n+1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g}\boldsymbol{X}_{n+1} = \boldsymbol{X}_n^{\mathrm{T}}\boldsymbol{S}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g}\boldsymbol{S}\boldsymbol{X}_n = \boldsymbol{X}_n^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g}\boldsymbol{X}_n = 0,\ n = 0,1,2,\cdots \tag{8.15}$$

可见，算法保持了增广系统的零锥结构。

最后，取 $\boldsymbol{X}$ 的前 n 个分量即得原系统的数值解，即

$$\boldsymbol{x}(t_n) = (X_1(t_n), X_2(t_n), \cdots, X_n(t_n))^{\mathrm{T}} \tag{8.16}$$

8.4 算　例

【例 8.1】 求解例 7.3 中的非线性周期系统响应问题：

$$\begin{cases} \dot{x}_1 = x_2 \\ \dot{x}_2 = -2.25x_1 - (x_1 - 1.5\sin t)^3 + 2\sin t \\ x_1(0) = 0.0,\ x_2(0) = 1.599\,29 \end{cases}$$

把它表示为式(7.20)的形式，其中

$$\boldsymbol{A} = \frac{1}{\|\boldsymbol{x}\|}\begin{bmatrix} 0 & 0 & f_1 \\ 0 & 0 & f_2 \\ f_1 & f_2 & 0 \end{bmatrix}$$

$\|\boldsymbol{x}\| = \sqrt{x_1^2 + x_2^2}$，$f_1 = x_2$，及 $f_2 = -2.25x_1 - (x_1 - 1.5\sin t)^3 +$

$2\sin t$。取步长 $h=0.1$，采用三阶格式，图 8.1 表示了零锥结构随时间的变化情况，即 $\Delta\|\boldsymbol{x}\| = \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g}\boldsymbol{X} = X_1^2+X_2^2-X_3^2 = x_1^2+x_2^2-\|\boldsymbol{x}\|^2$。与精确解比较数值解误差的范数 $\|\Delta\boldsymbol{x}\| = \sqrt{(\tilde{x}_1-x_1)^2+(\tilde{x}_2-x_2)^2}$ 随时间的变化情况如图 8.2 所示。

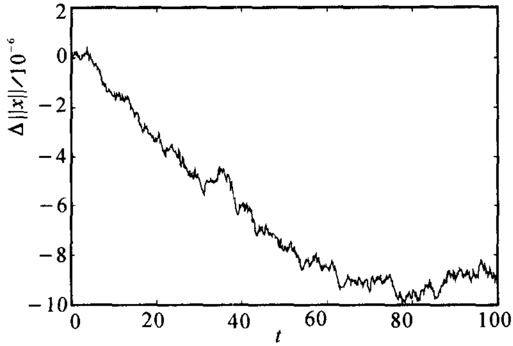


图 8.1　增广系统的近似锥结构

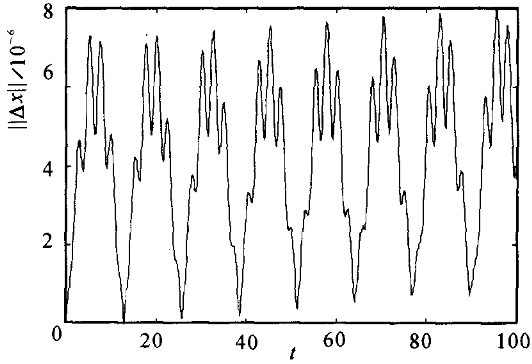


图 8.2　近似解的误差的范数

【例 8.2】　为了与精确解进行比较，考虑如下二阶常微分方程初值问题：

$$\ddot{x} = -(\dot{x})^2 - x + \ln t,\ x(1) = 0,\ \dot{x}(1) = 1$$

可以将上面二阶方程变为一阶常微分方程组，即

$$\begin{cases}\dot{x}_1 = x_2, & x_1(1) = 0 \\ \dot{x}_2 = -x_1 - x_2^2 + \ln t, & x_2(1) = 1\end{cases}$$

采用三阶格式求解。图 8.3 和图 8.4 分别表示了近似锥结构 $\Delta\|\boldsymbol{x}\| = \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g}\boldsymbol{X}$ 和数值解的误差的范数 $\|\Delta\boldsymbol{x}\|$。

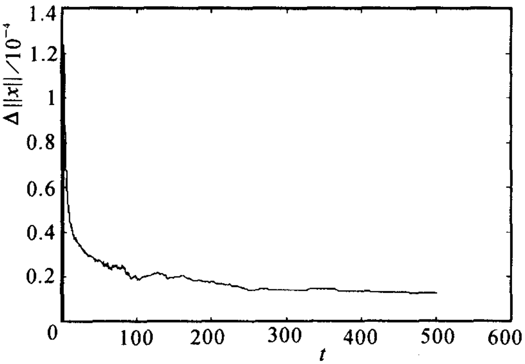


图 8.3　增广系统的近似锥结构

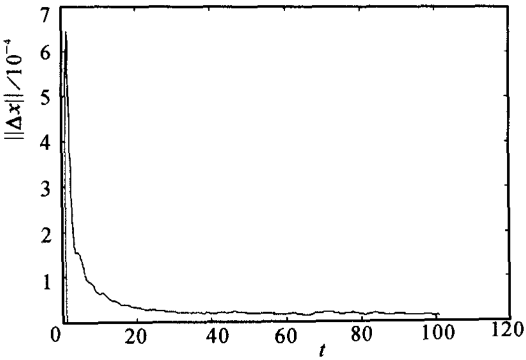


图 8.4　近似解的误差的范数

8.5　几何积分方法的向后误差分析性质

8.5.1　向后误差分析的基本概念

本节简单讨论李群方法的向后误差分析性质。向后误差分析是研究数值方法的长期行为的一个重要工具，同时可以用于数值方法的稳定性分析，另外它还用于讨论李群方法等几何积分方法所特有的几何性质。首先，根据向后误差分析理论，可以给出与原动力学问题具有相同定性性质的模拟矢量场，那么，数值解被理解为该模拟矢量场的流（即模拟的扰动微分方程的真解），而且模拟矢量场经常表示为步长 h 的幂级数形式，严格地讲，需要截断该级数以求其近似。因此还需要研究截断模拟矢量场的幂级数展开对于分析数值解与模拟微分方程的真解之间的误差的影响。这里，向后误差分析用于数值方法的稳定性分析，是指分析数值方法是否保持了原动力系统应有的定性性质，即保持周期轨道、稳定双曲不动点、吸引子等定性性质。譬如，向后误差分析理论表明辛算法能保持 Hamilton 系统的渐进稳定的周期轨道、Hopf 分叉、能量守恒等重要性质。

具体讲，向后误差分析理论用于研究给定常微分方程（矢量场）的真解、数值解 $\boldsymbol{x}_{n+1}=\boldsymbol{\Psi}_h(\boldsymbol{x}_n)$ 和相应的模拟微分方程 $\dot{\boldsymbol{x}}=\widetilde{\boldsymbol{X}}_i(\boldsymbol{x},h)(i\geqslant 1)$ 的解三者之间的相互关系，目的在于根据模拟微分方程的定性性质研究数值方法的长期的定性行为，进而根据数值解分析原问题真解的定性性质。首先要选取矢量场序列 $\widetilde{\boldsymbol{X}}_i(\boldsymbol{x},h)$，使得随着 i 的增加，它的精确解可以指数逼近数值解。

对于常微分方程，即

$$\dot{\boldsymbol{x}}=\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x},t) \tag{8.17}$$

设它的真解为 $\boldsymbol{\Phi}_{h,f}$，$\boldsymbol{\Phi}_{h,f}$ 又称为矢量场 $\boldsymbol{f}=\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x},t)$ 的时间 h 流。设

它的近似解为

$$\boldsymbol{x}_{n+1}=\boldsymbol{\Psi}_h(\boldsymbol{x}_n) \tag{8.18}$$

同时设 $\boldsymbol{\Psi}_h$ 是一个光滑映射、微分方程式(8.17) 的一个 p 阶算法，即

$$\|\boldsymbol{\Phi}_{h,f}(\boldsymbol{x}_n)-\boldsymbol{\Psi}_h(\boldsymbol{x}_n)\|=O(h^{p+1}) \tag{8.19}$$

那么，可以如下迭代生成矢量场序列 $\widetilde{\boldsymbol{X}}_i=\widetilde{\boldsymbol{X}}_i(x,h)$，使得该族矢量场的真解 $\boldsymbol{\Phi}_{h,\widetilde{X}_i}$ 与近似解 $\boldsymbol{\Psi}_h$ 非常逼近，即

$$\boldsymbol{\Phi}_{h,\widetilde{X}_i}\approx\boldsymbol{\Psi}_h \tag{8.20}$$

或者等价地记作

$$\boldsymbol{\Phi}_{1,X_i}\approx\boldsymbol{\Psi}_h,\quad \boldsymbol{X}_i(h)=h\widetilde{\boldsymbol{X}}_i \tag{8.21}$$

式中，h 应足够小，$\boldsymbol{\Phi}_{1,X_i}$ 表示矢量场 $\boldsymbol{X}_i$ 的时间 1 流。矢量场 $\boldsymbol{X}_i$ 可以表示为时间步长的幂级数形式，即

$$\boldsymbol{X}_i=h\Delta\boldsymbol{X}_1+h^2\Delta\boldsymbol{X}_2+\cdots+h^i\Delta X_i,\ i=1,2,\cdots \tag{8.22}$$

它是所求模拟矢量场

$$\boldsymbol{X}(h)=h\Delta\boldsymbol{X}_1+h^2\Delta\boldsymbol{X}_2+\cdots+h^i\Delta\boldsymbol{X}_i+\cdots \tag{8.23}$$

的截断形式。显然，有

$$\boldsymbol{X}_{i+1}=\boldsymbol{X}_i+h^{i+1}\Delta\boldsymbol{X}_{i+1} \tag{8.24}$$

假设已经选取适当的 $\boldsymbol{X}_i$，使得矢量场 $\boldsymbol{X}_i$ 的时间 1 流 $\boldsymbol{\Phi}_{1,X_i}$ 和数值解 $\boldsymbol{\Psi}_h$ 的差为 $O(h^{i+1})$，那么，可以进行如下循环来生成 $\Delta\boldsymbol{X}_{i+1}$ 和 $\boldsymbol{X}_{i+1}$，即

$$\boldsymbol{X}_{i+1}=\boldsymbol{X}_i+h^{i+1}\Delta\boldsymbol{X}_{i+1} \tag{8.25}$$

$$\Delta\boldsymbol{X}_{i+1}=\lim_{h\to 0}\frac{\boldsymbol{\Psi}_h-\boldsymbol{\Phi}_{1,X_i}}{h^{i+1}} \tag{8.26}$$

式(8.26) 中 $\Delta\boldsymbol{X}_{i+1}$ 的定义表明，式(8.25) 定义的 $\boldsymbol{X}_{i+1}$ 生成的时间 1 流 $\boldsymbol{\Phi}_{1,Xi+1}$ 和数值解 $\boldsymbol{\Psi}_h$ 比较是 $O(h^{i+2})$，因为

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\Phi}_{1,X_{i+1}}-\boldsymbol{\Psi}_h&=\boldsymbol{\Phi}_{1,X_i}+h^{i+1}\Delta\boldsymbol{X}_{i+1}-\boldsymbol{\Psi}_h+O(h^{i+2})=\\&h^{i+1}\Delta\boldsymbol{X}_{i+1}-h^{i+1}\lim_{h\to 0}\frac{\boldsymbol{\Psi}_h-\boldsymbol{\Phi}_{1,X_i}}{h^{i+1}}+O(h^{i+2})=\end{aligned}$$

$$O(h^{i+2}) \tag{8.27}$$

因此,完成式(8.25)和式(8.26)的循环即可得到模拟矢量场 $\boldsymbol{X}_i$ $(i=1,2,\cdots)$。显然,该循环始于 $\boldsymbol{X}_1 = h\boldsymbol{f}$。

8.5.2 几何积分方法的向后误差分析性质

定理8.1 假设微分方程式(8.17)中的矢量场 $\boldsymbol{f}$ 属于某李代数 g,即 $\boldsymbol{f} \in g$,并假设数值积分格式式(8.18)是一个李群积分方法,也就是对于足够小的时间步长 $h \geqslant 0$,$\boldsymbol{\Psi}_h \in G$,其中,$G$ 是对应于李代数 g 的李群。那么,由式(8.25),式(8.26)定义的扰动矢量场 $\boldsymbol{X}_i$,$i=1,2,\cdots$,均属于原李代数 g,即 $\boldsymbol{X}_i \in g$。

证明 可以用数学归纳法证明。显然,对于 $\boldsymbol{X}_1 = h\boldsymbol{f}$,结论成立。假设结论对于 $\boldsymbol{X}_i$ 也成立,即对于足够小的时间步长 h,有 $\boldsymbol{X}_i \in g$。下面证明 $\boldsymbol{X}_{i+1} \in g$。因为

$$\boldsymbol{X}_i \in g \tag{8.28}$$

那么它的时间1流 $\boldsymbol{\Phi}_{1,X_i}$ 属于李群 G,即 $\boldsymbol{\Phi}_{1,X_i} \in G$,而对足够小的 h,李群积分方法 $\boldsymbol{\Psi}_h \in G$,而且

$$\boldsymbol{\Psi}_{h=0} = \boldsymbol{\Phi}_{1,X_i(h=0)} = \boldsymbol{id} \tag{8.29}$$

式中,$\boldsymbol{id}$ 是恒等映射,即 $\boldsymbol{id}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x}$,于是有

$$\Delta\boldsymbol{X}_{i+1} = \lim_{h\to 0}\frac{\boldsymbol{\Psi}_h - \boldsymbol{\Phi}_{1,X_i}}{h^{i+1}} \in T_{id}G = g \tag{8.30}$$

因此,由式(8.28),式(8.30)和式(8.25)可知 $\boldsymbol{X}_{i+1} \in g$。

8.5.3 向后误差分析的截断误差

为了讨论扰动矢量场的真解与数值解的误差,假设式(8.17)中的 $\boldsymbol{f}$ 是实解析的,并引入一些新的记号:记 $B_r(\boldsymbol{x}_0) \subset C^n$ 是以 $\boldsymbol{x}_0 \in R^n$ 为中心,以 $r>0$ 为半径的复球,定义

$$\|\boldsymbol{z}\| = \max_{i=1,\cdots,n} |z_i|, \quad \boldsymbol{z} \in C^n \tag{8.31}$$

设存在相空间上的紧致子集 $U \subset R^n$ 和一个常数 $r>0$,使得对于

所有的 $x_0 \in U$，解析矢量场 $\boldsymbol{Y}$ 在 $B_r(\boldsymbol{x}_0)$ 上都是有界的，那么定义

$$\| \boldsymbol{Y} \|_r = \sup_{x \in B_r U} \| \boldsymbol{Y}(\boldsymbol{x}) \| \tag{8.32}$$

式中，$B_r U = \bigcup_{x_0 \in U} B_r(\boldsymbol{x}_0)$。另外定义 $B_0 U = U$ 及 $\| \boldsymbol{Y} \|_0 = \sup_{x \in U} \| \boldsymbol{Y}(\boldsymbol{x}) \|$。下面首先对数值解映射 $\boldsymbol{\Psi}_h$ 做一个初步的估计，而后给出它与模拟矢量场的真解的误差。

引理 8.1 假设式(8.17)中的矢量场 $\boldsymbol{f}$ 是实解析的，存在相空间的紧致子集 U 和常数 $K, R > 0$，使得 $\| \boldsymbol{f} \|_R \leqslant K$，又假设数值方法 $\boldsymbol{\Psi}_h$ 是实解析的，那么，存在常数 $M \geqslant K$，使得

$$\| \boldsymbol{\Psi}_h - \boldsymbol{id} \|_{\alpha R} \leqslant | h | M \leqslant (1 - \alpha)R,$$

$$| h | \leqslant \frac{(1 - \alpha)R}{M} \tag{8.33}$$

式中，$\alpha \in [0,1]$。

定理 8.2 假设式(8.17)中的矢量场 $\boldsymbol{f}$ 是实解析的，存在相空间的紧致子集 U 和常数 $K, R > 0$，使得 $\| \boldsymbol{f} \|_R \leqslant K$，而且数值方法 $\boldsymbol{\Psi}_h$ 是实解析的，记 $\widetilde{\boldsymbol{X}}_{i*}$ 对应于式(8.25)迭代产生的 $\boldsymbol{X}_i$，$i = 1,2,\cdots$ 中的最优矢量场 $\boldsymbol{X}_{i*}$，那么，存在实解析矢量场 $\widetilde{X}_{i*}: V \subset R^n \to R^n$，$U \subset V$，使得

$$\| \boldsymbol{\Psi}_h - \boldsymbol{\Phi}_{h,\widetilde{\boldsymbol{X}}_{i*}} \|_0 \leqslant 8hbMe^{-p}\mathrm{e}^{-\gamma/h} \tag{8.34}$$

式中，$\gamma = R/(cMe)$，$b = 20$。而 $p \geqslant 1$ 是数值方法的计算精度。另外，对模拟矢量场 $\widetilde{\boldsymbol{X}}_{i*}$，有如下估计：

$$\| \widetilde{\boldsymbol{X}}_{i*} - \boldsymbol{f} \|_0 = 2d_p bM\left(\frac{chM}{R}\right)^p \tag{8.35}$$

式中，$c = 300$，$d_p \geqslant 1$ 是依赖于数值方法的计算精度 p 的常数，例如，$d_1 = 0.8$，$d_2 = 1.5$，$d_3 = 3.7$ 以及 $d_4 = 12.8$。

引理 8.1 和定理 8.2 的证明见文献[16]。它主要根据三角不等式和李群的切空间上的线性性质进行证明。

事实上，上述给出了对李群积分方法进行向后误差分析的方

法。不同的动力学系统具有不同的性质特征。一般地，要具体问题具体分析，文献[16]用李群积分方法讨论了 Hamilton 系统的长期积分问题和一些重要的物理量沿其数值解形成的轨线上的时间平均近似。

8.6　本章小结

一般非线性的动力学系统都可以转化为 Minkowski 空间的增广的动力学系统，则局部地呈现为李型方程。本书基于增广动力学系统形式和 RKMK 方法构造了求解非线性的动力学系统的一个简单易行的积分方法。其中涉及的指数矩阵的计算精度很重要，采用精细积分方法可以满足要求。本章方法依然属于几何积分，其优点在于操作简单，且是显式的积分格式。另外，讨论了李群方法的向后误差分析性质。向后误差分析可以研究数值方法的长期行为，同时可以用于数值方法的稳定性分析，它是李群方法等几何积分方法所特有的性质，因此进一步体现了本书强调的李群积分方法的优越性。

参考文献

1　Butcher J C. Coefficients for the study of Runge-Kutta integration processes. J. Austral. Math. Soc., 1963, 3: 185 ~ 201

2　Butcher J C. An algebraic theory of integration methods. Math. Comput., 1972, 26: 79 ~ 106

3　Sanz-Serna J M. Symplectic integrators for Hamiltonian problems: An overview. Acta. Numerica, 1992, 1: 243 ~ 286

4　Iserles A. Solving linear ordinary differential equations by exponentials of iterated commutators. Numer. Math., 1984, 45: 183 ~ 199

5　Dieci L, Russell R D, Van Vleck E S. Unitary integrators and applications to continuous othonormalization techniques. SIAM J.

Numer. Anal. 1994, 31: 261 ~ 281

6 Iserles A, Munthe-Kaas H Z, Nφrsett S P, Zanna A. Lie-group methods. Acta. Numerica, 2000, 9: 215 ~ 365

7 Munthe-Kaas H. Lie-Butcher theory for Runge-Kutta methods. BIT, 1995, 35: 572 ~ 587

8 Munthe-Kaas H. High order Runge-Kutta methods on manifolds. Applied Numerical Mathematics, 1999, 29(1): 115 ~ 127

9 Munthe-Kaas H. Runge-Kutta methods on Lie group. BIT, 1998, 38(1): 92 ~ 111

10 Crouch P E, Grossman R. Numerical integration of ordinary differential equations on manifolds. J. Nonlinear Sci. , 1993, 3: 1 ~ 33

11 Engo K. On the construction of geometric integrators in the RKMK class. BIT, 2000, 40(1): 41 ~ 61

12 Liu C S. Cone of non-linear dynamical system and group preserving schemes, International Journal of Non-linear Mechanics, 2001, 36: 1 047 ~ 1 068

13 Hong H K, Liu C S. Some physical models with Minkowski spacetime structure and Lorentz group symmetry. International Journal of Non-linear Mechanics, 2001, 36: 1 075 ~ 1 084

14 钟万勰. 结构动力学方程的精细时程积分法. 大连理工大学学报, 1994, 34(2): 131 ~ 136

15 钟万勰,欧阳华江,邓子辰. 计算结构力学与最优控制. 大连:大连理工大学出版社,1993

16 Reich S. Backward error analysis for numerical integrators. SIAM J. Numer. Anal. , 1999, 36(5): 1 549 ~ 1 570

17 Hairer E, Lubich Ch. The life-span of backward error analysis for numerical integrators. Numer. Math. 1997, 76: 441 ~ 462

18 Benettin G, Giorgilli A. On the Hamilton interpolation of near to the identity symplectic mappings with application to symplectic integration algorithms. J. Statist. Phys. , 1994, 74: 1 117 ~ 1 143

19 Reich S. On higher-order semi-explicit symplectic partitioned

Runge-Kutta methods for constrained Hamiltonian systems. Numer. Math. 1997，76：231 ~ 247

20 Faltinsen S. Backward error analysis for Lie group methods. BIT, 2000，40(4)：652 ~ 670

第九章　非线性动力学方程的精细积分法

9.1　引　言

钟万勰等人提出的精细积分法，用于求解线性定常结构动力学方程的数值解，结果非常准确；对于齐次结构动力学方程，形式十分简单，只需计算出相应的指数矩阵，并代入初始条件，就可以逐步积分[1~2]。但对于非齐次的结构动力学方程，精细积分法除了计算相应的指数矩阵，还要对矩阵求逆[3~5]，即使非齐次项是常数也是如此，这不仅引起算法编程的不便，而且有时还会遇到矩阵求逆的数值不稳定性，或者逆矩阵不存在等问题，这就限制了精细积分法的应用范围。

文献[6,7]提出了增维精细积分法，采用增维的方法，将非齐次项也看做动力学方程的状态变量，将其纳入到求解中去，从而将非齐次的动力学方程化为齐次方程。但是所得到的齐次动力学方程的维数是原来动力学方程维数的两倍。计算量还是比较大。本章旨在把精细积分方法应用于一般非线性动力学方程，类同于第五章，局部地把非线性动力学系统 $\dot{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x},t)$ 转化为 Minkowski 空间的增广动力学系统 $\dot{\boldsymbol{X}} = \boldsymbol{AX}$，它呈现出简单的齐次方程形式，便于实施精细积分法[8]。另一方面为简单应用，本章还通过增加一个变量及一个简单方程 $x_{n+1} = 1$，将原动力学方程化为齐次方程形式进行精细积分[9]。将精细积分法和 Runge-kutta 方法相结合来讨论一般动力学方程的数值求解也是一个有效的途径。这些处理都把含时间的外部激励纳入了精细积分的细化过程，同时避免了

矩阵求逆问题。因而在编程实现和数值稳定上都更加有利。

由于第七章及第八章讲述算法中都包含了指数矩阵，指数矩阵的计算精度直接影响到算法的精度，因此，本章的精细积分方法可以用于前两章的矩阵取指数。

9.2　非线性动力学方程在 Minkowski 空间的精细积分方法

设一般非线性动力学方程为

$$\dot{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x},t), \quad \boldsymbol{x}(t_0) = \boldsymbol{x}_0 \tag{9.1}$$

它可转化为 Minkowski 空间上的李型方程式(7.20)。设时间步长 h 足够小，方程在各个小区间$[t_k, t_{k+1}]$，$t_k = t_0 + kh$，$k = 0,1,2,\cdots$ 上可以看做常系数微分方程，它的数值解可以通过矩阵取指数获得，下面使用精细积分法来计算。为方便起见，不妨设 $t_0 = 0$，记 $\boldsymbol{A}_k = \boldsymbol{A}[\boldsymbol{X}(kh), kh]$，则

$$\begin{aligned}\boldsymbol{X}((k+1)h) = \exp(\boldsymbol{A}_k h)\boldsymbol{X}(kh) = \\ [\exp(\boldsymbol{A}_k h/m)]^m \boldsymbol{X}(kh),\ k = 0,1,2,\cdots\end{aligned} \tag{9.2}$$

取 $m = 2^L$，例如 $L = 20$，那么 $m = 1\ 048\ 576$。令 $\Delta t = h/m$，则

$$\exp(\boldsymbol{A}_k \Delta t) \approx \boldsymbol{I} + \boldsymbol{A}_k \Delta t + (\boldsymbol{A}_k \Delta t)^2/2 = \boldsymbol{I} + \boldsymbol{T}_a \tag{9.3}$$

式中

$$\boldsymbol{T}_a = \boldsymbol{A}_k \Delta t + (\boldsymbol{A}_k \Delta t)^2/2 \tag{9.4}$$

令

$$\boldsymbol{T}_k = \exp(h\boldsymbol{A}_k) = [\boldsymbol{I} + \boldsymbol{T}_a]^{2^L} = [\boldsymbol{I} + \boldsymbol{T}_a]^{2^{L-1}} \times [\boldsymbol{I} + \boldsymbol{T}_a]^{2^{L-1}} \tag{9.5}$$

可以实行如下循环语句来计算 $\boldsymbol{T}_k$，即

for (iter = 0; iter < L; iter ++)

$$\boldsymbol{T}_a = 2 \times \boldsymbol{T}_a + \boldsymbol{T}_a \times \boldsymbol{T}_a \tag{9.6}$$

循环结束时，得到

$$\boldsymbol{T}_k = \boldsymbol{I} + \boldsymbol{T}_a \tag{9.7}$$

那么，$\boldsymbol{X}[(k+1)h] = \boldsymbol{T}_k\boldsymbol{X}(kh)$，$k = 0,1,2,\cdots$。须要说明的是，在 Minkowski 空间进行的上述精细积分法是保群的。下面给出指数矩阵保群性质的证明。

定理 9.1 如果矩阵 $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{B}(\boldsymbol{x})$ 属于某李代数 g_N，即 $\boldsymbol{B} \in g_N = \{\boldsymbol{B} \mid \boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{N} + \boldsymbol{N}\boldsymbol{B} = \boldsymbol{0}\}$，那么它的指数矩阵属于李代数 g_N 对应的李群，即 $\exp(t\boldsymbol{B}) \in G_N = \{\boldsymbol{Z} \mid \boldsymbol{Z}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{N}\boldsymbol{Z} = \boldsymbol{N}\}$。

证明 首先要记住 $\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{N} = \boldsymbol{N}\boldsymbol{B} = \boldsymbol{0}$，则有

$$\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{N} = -\boldsymbol{N}\boldsymbol{B}$$

$$\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{N} = \boldsymbol{N}\boldsymbol{B}\boldsymbol{B}$$

$$(\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}})^{2k-1}\boldsymbol{N} = -\boldsymbol{N}(\boldsymbol{B})^{2k-1},\ k = 1,2,\cdots$$

$$(\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}})^{2k}\boldsymbol{N} = \boldsymbol{N}(\boldsymbol{B})^{2k},\ k = 1,2,\cdots$$

那么

$$\begin{aligned}
&(\exp(t\boldsymbol{B}))^{\mathrm{T}}\boldsymbol{N}\exp(t\boldsymbol{B}) = \\
&\left(\boldsymbol{I} + t\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}} + \frac{t^2}{2!}(\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}})^2 + \cdots + \frac{t^n}{n!}(\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}})^n + \cdots\right)\cdot \boldsymbol{N} \cdot \\
&\left(\boldsymbol{I} + t\boldsymbol{B} + \frac{t^2}{2!}\boldsymbol{B}^2 + \cdots + \frac{t^n}{n!}\boldsymbol{B}^n + \cdots\right) = \\
&\boldsymbol{N} + t\boldsymbol{N}\boldsymbol{B} + \frac{t^2}{2!}\boldsymbol{N}\boldsymbol{B}^2 + \cdots + \frac{t^n}{n!}\boldsymbol{N}\boldsymbol{B}^n + \cdots + \\
&t\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{N} + t^2\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{N}\boldsymbol{B} + \frac{t^3}{2!}\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{N}\boldsymbol{B}^2 + \cdots + \frac{t^n}{(n-1)!}\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{N}\boldsymbol{B}^{n-1} + \cdots + \\
&\frac{t^2}{2!}(\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}})^2\boldsymbol{N} + \frac{t^3}{2!}(\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}})^2\boldsymbol{N}\boldsymbol{B} + \cdots + \\
&\frac{t^n}{(n-2)!2!}(\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}})^2\boldsymbol{N}\boldsymbol{B}^{n-2} + \cdots + \\
&\frac{t^n}{n!}(\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}})^n\boldsymbol{N} + \frac{t^{n+1}}{n!}(\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}})^n\boldsymbol{N}\boldsymbol{B} + \frac{t^{n+2}}{n!2!}(\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}})^n\boldsymbol{N}\boldsymbol{B}^2 + \cdots
\end{aligned}$$

由上可见 t^n 的系数为

$$\boldsymbol{a}_n = \frac{1}{n!}\boldsymbol{N}\boldsymbol{B}^n + \frac{1}{(n-1)!}\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{N}\boldsymbol{B}^{n-1} + \frac{1}{(n-2)!2!}(\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}})^2\boldsymbol{N}\boldsymbol{B}^{n-2} + \cdots + \frac{1}{n!}(\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}})^n\boldsymbol{N} = \frac{1}{n!}\boldsymbol{N}\boldsymbol{B}^n(C_n^0(-1)^0 + C_n^1(-1)^1 + \cdots + C_n^k(-1)^k + \cdots + C_n^n(-1)^n) = \frac{1}{n!}(1-1)^n\boldsymbol{N}\boldsymbol{B}^n = 0, \quad n = 1,2,\cdots$$

因此
$$(\exp(t\boldsymbol{B}))^{\mathrm{T}}\boldsymbol{N}\exp(t\boldsymbol{B}) = \boldsymbol{N}$$

因此，当原动力学系统是自治系统时，本节所讲述的方法是保群的。仔细观察，不难发现式(9.2) 与式(7.106) 类似，所以说，对于非自治系统，式(9.2) 是一个二阶的格式，是一个二阶的保结构算法。

9.3　增维的精细积分法

一般地，对于一般非线性动力学方程式(9.1)，$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x},t)$ 总可以表示为

$$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x},t) = \boldsymbol{S}(\boldsymbol{x},t)\boldsymbol{x} + \boldsymbol{v}(\boldsymbol{x},t) \tag{9.8}$$

式中，$\boldsymbol{S}$ 是 $n \times n$ 函数矩阵，$\boldsymbol{v}$ 是 n 维矢量函数，那么，有

$$\dot{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{S}(\boldsymbol{x},t)\boldsymbol{x} + \boldsymbol{v}(\boldsymbol{x},t) \tag{9.9}$$

这样，非线性动力学方程式(9.1) 就形式地化为非齐次线性方程式(9.9)，进一步引入新变量 $x_{n+1} \equiv 1$，则 $\dot{x}_{n+1} = 0$。式(9.9) 就增加一维变成如下齐次方程形式：

$$\dot{\boldsymbol{Y}} = \begin{bmatrix} \dot{\boldsymbol{x}} \\ \dot{x}_{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{S} & \boldsymbol{v} \\ 0 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \boldsymbol{x} \\ x_{n+1} \end{bmatrix} = \boldsymbol{H}\begin{bmatrix} \boldsymbol{x} \\ x_{n+1} \end{bmatrix} = \boldsymbol{H}\boldsymbol{Y} \tag{9.10}$$

式中，$\boldsymbol{Y} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{x} \\ x_{n+1} \end{bmatrix}$。应当指出，式(9.10) 只是形式上表现为线性齐

次方程，它实际上是非定常、非线性的。在区间$[t_k, t_{k+1}]$上，式(9.10)可看做是常系数微分方程，即

$$\dot{\boldsymbol{Y}} = \boldsymbol{H}_k \boldsymbol{Y} \tag{9.11}$$

式中，$\boldsymbol{H}_k = \boldsymbol{H}[\boldsymbol{Y}(kh), kh]$。这样就有

$$\boldsymbol{Y}[(k+1)h] = \exp(\boldsymbol{H}_k h)\boldsymbol{Y}(kh),\ k = 1,2,\cdots \tag{9.12}$$

在一个时间步长内可以如式(9.4)、式(9.6)、式(9.7)精细计算式(9.12)。从而可得原动力学微分方程式(9.1)的数值解。

9.4 对称合成方法

考虑微分方程

$$\dot{\boldsymbol{x}} = \hat{\boldsymbol{A}}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{g}(t) \tag{9.13}$$

式中，$\hat{\boldsymbol{A}}$是$n \times n$常数矩阵，$\boldsymbol{g}(t)$是给定外力n维向量函数。那么，可以把式(9.13)分裂为两个微分方程，即

$$\dot{\boldsymbol{x}} = \hat{\boldsymbol{A}}\boldsymbol{x} \tag{9.14}$$

与

$$\dot{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{g}(t) \tag{9.15}$$

然后分别求解式(9.14)和式(9.15)，再根据合成法或对成合成的方法求出原问题的近似解。方程(9.14)的解可以写为

$$\boldsymbol{x} = \exp(\hat{\boldsymbol{A}}t) \cdot \boldsymbol{x}_0 \tag{9.16}$$

在一系列等步长的时刻，即

$$t_0 = 0,\ t_1 = h, \cdots, t_k = kh, \cdots$$

齐次方程式(9.14)可根据精细积分方法得出如下形式数值解，即

$$\boldsymbol{x}_{k+1} = \exp(\hat{\boldsymbol{A}}h)\boldsymbol{x}_k = \boldsymbol{T}\boldsymbol{x}_k,\ k = 0,1,2,\cdots,\ \boldsymbol{T} = \exp(\hat{\boldsymbol{A}}h) \tag{9.17}$$

微分方程式(9.15)不难求解，甚至它可精确求解。记它的解为算子形式，即

$$\boldsymbol{x}_{k+1} = \exp(\hat{\boldsymbol{B}}h)\boldsymbol{x}_k = \boldsymbol{x}_k + \boldsymbol{G}(t_{k+1}) - \boldsymbol{G}(t_k),\ k = 0,1,2,\cdots \tag{9.18}$$

其中，$\boldsymbol{G}(t)$ 为 $\boldsymbol{g}(t)$ 的原函数。根据式(9.17)和式(9.18)，利用对称合成的积分思想可构造原动力学系统的积分方法。例如可采用不低于四阶的数值方法近似求解式(9.18)，而后，由四阶对称合成积分法可近似求出原问题式(9.13)的解，即

$$\boldsymbol{x}_{k+1}=\prod_{i=1}^{4}\exp(c_i\hat{\boldsymbol{A}}h)\exp(d_i\hat{\boldsymbol{B}}h)\boldsymbol{x}_k,\ k=0,1,2,\cdots \tag{9.19}$$

式中

$$c_1=c_4=\frac{1}{2(1+\alpha)},\quad d_1=d_3=\frac{1}{1+\alpha}$$

$$c_2=c_3=\frac{\alpha}{2(1+\alpha)},\quad d_2=\frac{\alpha-1}{1+\alpha},\quad d_4=0 \tag{9.20}$$

及

$$\alpha=1-2^{1/3}$$

还可以根据 Yoshida 的合成技术，由对称的二阶近似格式 $\exp(\hat{\boldsymbol{A}}h)$ 和 $\exp(\hat{\boldsymbol{B}}h)$ 采用较少的合成步骤构造高阶近似方法。

9.5　精细 Runge-Kutta 方法

对于微分方程式(9.13)，按常微分方程求解理论，应当首先求解其齐次方程式(9.14)，其通解可写成为式(9.16)的形式。那么，在一系列等步长的时刻 $t_0=0,\ t_1=h,\cdots,t_k=kh,\cdots$，方程式(9.14)有数值解，即

$$\boldsymbol{x}_{k+1}=\boldsymbol{T}\boldsymbol{x}_k,\ k=0,1,2,\cdots,\ \boldsymbol{T}=\exp(\hat{\boldsymbol{A}}h) \tag{9.21}$$

对于非齐次方程式(9.13)，它的解可以写成如下形式：

$$\boldsymbol{x}_{k+1}=\exp(\hat{\boldsymbol{A}}h)\boldsymbol{x}_k+\int_{t_k}^{t_{k+1}}\exp[\hat{\boldsymbol{A}}(t_{k+1}-s)]\boldsymbol{g}(s)\mathrm{d}s \tag{9.22}$$

式(9.22)等号右边的积分可以用四阶 Runge-Kutta 方法求得，则有

$$\boldsymbol{x}_{k+1}=\exp(\hat{\boldsymbol{A}}h)\boldsymbol{x}_k+h\left(\frac{1}{6}\boldsymbol{k}_1+\frac{1}{3}\boldsymbol{k}_2+\frac{1}{3}\boldsymbol{k}_3+\frac{1}{6}\boldsymbol{k}_4\right) \tag{9.23}$$

式中

$$\left.\begin{aligned} \boldsymbol{k}_1 &= \exp(\hat{\boldsymbol{A}}h)\boldsymbol{g}(t_k) \\ \boldsymbol{k}_2 &= \exp\left(\frac{1}{2}\hat{\boldsymbol{A}}h\right)\boldsymbol{g}\left(t_k + \frac{h}{2}\right) \\ \boldsymbol{k}_3 &= \boldsymbol{k}_2 \\ \boldsymbol{k}_4 &= \boldsymbol{g}(t_k + h) \end{aligned}\right\} \tag{9.24}$$

式中出现的指数矩阵 $\boldsymbol{T} = \exp(\hat{\boldsymbol{A}}h)$ 及 $\boldsymbol{T}_1 = \exp\left(\frac{1}{2}\hat{\boldsymbol{A}}h\right)$ 可以通过式(9.4)、式(9.6)及式(9.7)精细计算获得。那么式(9.23)可以写为

$$\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{T}\boldsymbol{x}_k + h\left(\frac{1}{6}\boldsymbol{k}_1 + \frac{1}{3}\boldsymbol{k}_2 + \frac{1}{3}\boldsymbol{k}_3 + \frac{1}{6}\boldsymbol{k}_4\right) \tag{9.25}$$

式中

$$\left.\begin{aligned} \boldsymbol{k}_1 &= \boldsymbol{T}\boldsymbol{g}(t_k) \\ \boldsymbol{k}_2 &= \boldsymbol{T}_1\boldsymbol{g}\left(t_k + \frac{h}{2}\right) \\ \boldsymbol{k}_3 &= \boldsymbol{k}_2 \\ \boldsymbol{k}_4 &= \boldsymbol{g}(t_k + h) \\ \boldsymbol{x}_k &= \boldsymbol{x}(kh),\ k = 0,1,2,\cdots \end{aligned}\right\} \tag{9.26}$$

对于一般非线性动力学方程式(9.1)，$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x},t)$ 总可以表示为 $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x},t) = \hat{\boldsymbol{A}}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x},t)$，则原动力学系统可写为

$$\dot{\boldsymbol{x}} = \hat{\boldsymbol{A}}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x},t) \tag{9.27}$$

这里，$\hat{\boldsymbol{A}}$ 仍然是 $n \times n$ 常数矩阵。这样，非线性动力学方程式(9.1)就化成了非齐次线性方程式(9.27)，所以，可以应用上述方法，有

$$\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{T}\boldsymbol{x}_k + h\left(\frac{1}{6}\boldsymbol{k}_1 + \frac{1}{3}\boldsymbol{k}_2 + \frac{1}{3}\boldsymbol{k}_3 + \frac{1}{6}\boldsymbol{k}_4\right),\ k = 0,1,2,\cdots \tag{9.28}$$

式中

$$\left.\begin{aligned} \boldsymbol{k}_1 &= \boldsymbol{T}\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}_k, t_k) \\ \boldsymbol{k}_2 &= \boldsymbol{T}_1\boldsymbol{g}\left(\boldsymbol{x}_k + \frac{\boldsymbol{k}_1}{2}, t_k + \frac{h}{2}\right) \\ \boldsymbol{k}_3 &= \boldsymbol{T}_1\boldsymbol{g}\left(\boldsymbol{x}_k + \frac{\boldsymbol{k}_2}{2}, t_k + \frac{h}{2}\right) \\ \boldsymbol{k}_4 &= \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}_k + \boldsymbol{k}_3, t_k + h) \end{aligned}\right\} \tag{9.29}$$

使用 Runge-Kutta 方法要求满足严格的稳定性条件，刚性问题就很难满足其前提条件，如果同时使用精细积分法，则稳定性问题迎刃而解。

9.6 算　例

【例 9.1】 求解受迫 Van der Pol 方程：

$$\begin{bmatrix}\dot{x}_1\\ \dot{x}_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0 & a\\ -a & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\ x_2\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}0\\ \varepsilon(1-x_1^2)x_2+f_0\cos\omega t\end{bmatrix}$$

式中，α 及 ε 是物理参数，f_0 是频率为 ω 的外部激励的振幅。根据式(7.20) 它可表示为

$$\begin{bmatrix}\dot{x}_1\\ \dot{x}_2\\ \dfrac{\mathrm{d}\|\boldsymbol{x}\|}{\mathrm{d}t}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0 & \alpha & 0\\ -\alpha & 0 & \dfrac{\varepsilon(1-x_1^2)x_2+f_0\cos(\omega t)}{\sqrt{x_1^2+x_2^2}}\\ 0 & \dfrac{\varepsilon(1-x_1^2)x_2+f_0\cos(\omega t)}{\sqrt{x_1^2+x_2^2}} & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\ x_2\\ \|\boldsymbol{x}\|\end{bmatrix}$$

在一个时间步长内把它看做是定常系统，则可以应用精细积分。采用积分格式式(9.2)，当 $a=1$，$\varepsilon=1$，$\omega=1.2$，振幅 $f_0=0$ 及 5 时，其数值解产生的轨线示于图 9.1 和图 9.2，图中没有画出始于初始点 $x_1=2$ 及 $x_2=0$ 的暂态轨线部分(时间步长 $h=0.1$)。同时图中画出了由四阶 Runge-Kutta 方法得到的相曲线，二者几乎是重合的。

【例 9.2】 考虑如下受迫 Duffing 方程：

$$\begin{cases}\dot{x}_1=x_2\\ \dot{x}_2=-\gamma x_2-\alpha x_1-\beta x_1^3+f_0\cos(\omega t)\end{cases}$$

式中，α，β 及 γ 是物理参数，f_0 是频率为 ω 的外部激励的振幅。根据式(9.10) 它可表示为

$$\begin{bmatrix}\dot{x}_1\\ \dot{x}_2\\ \dot{x}_3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0 & 1 & 0\\ -\alpha-\beta x_1^2 & -\gamma & f_0\cos(\omega t)\\ 0 & 0 & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\ x_2\\ x_3\end{bmatrix}$$

式中，$x_3\equiv 1$，在一个时间步长内把它看做是定常系统，则可以应用精细积分，采用积分格式式(9.12)，当 $\omega=1.2$，$\alpha=-1$，$\beta=1$，$\gamma=0.3$，振幅分别为 $f_0=0.2$，0.27，0.286 7 及 0.287 1 时，由图 9.3 至图 9.6 所示的数值结果可见，它们分别是一周期、二周期、四周期及八周期响应。图中没有画出始于初始点 $x_1=2$ 及 $x_2=0$ 的暂态轨线部分。其中，取时间步长 $h=0.01$。

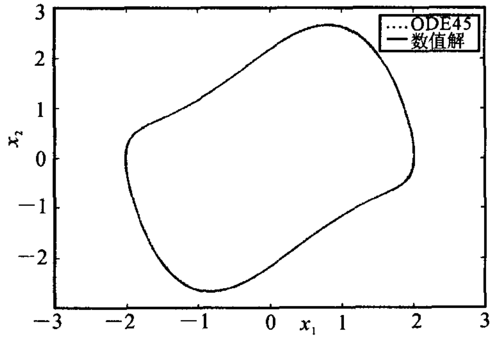


图 9.1 $f_0=0$ 对应的相曲线

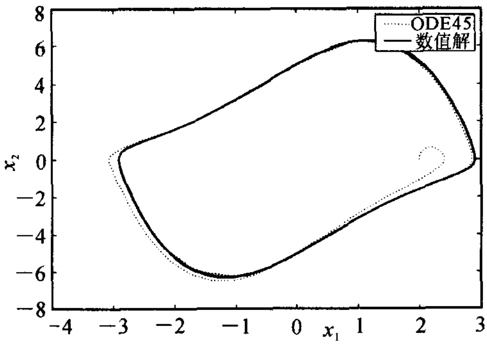


图 9.2 $f_0=5$ 对应的相曲线

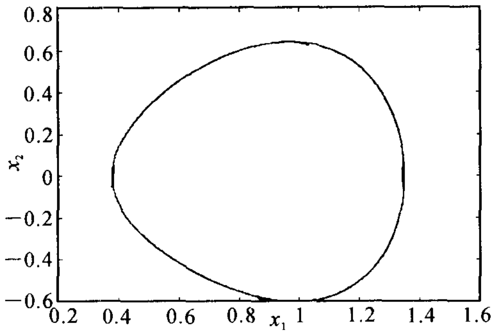


图 9.3　$f_0=0.2$ 时呈现的一周期响应

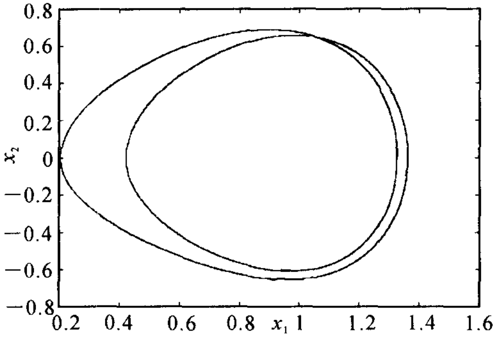


图 9.4　$f_0=0.27$ 时呈现的二周期响应

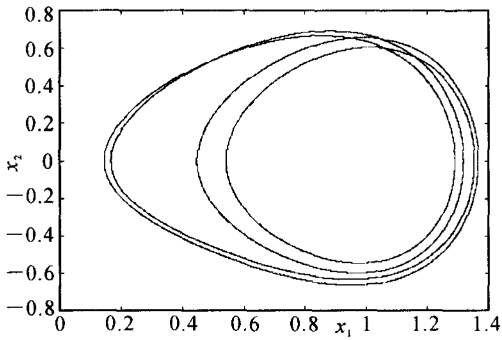


图 9.5　$f_0=0.286\ 7$ 时呈现的四周期响应

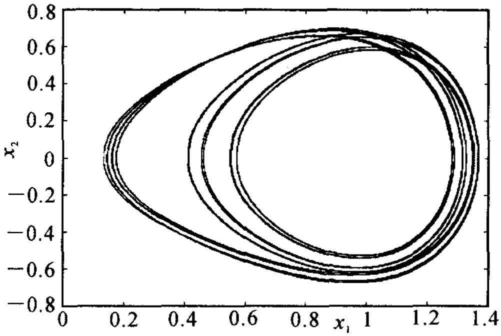


图 9.6　$f_0 = 0.287\,1$ 时呈现的八周期响应

【例 9.3】　求解非线性周期系统响应问题：

$$\begin{cases} \dot{x}_1 = x_2 \\ \dot{x}_2 = -2.25x_1 - (x_1 - 1.5\sin t)^3 + 2\sin t \\ x_1(0) = 0.0,\ x_2(0) = 1.599\,29 \end{cases}$$

其精确解是 $\begin{cases} x_1(t) = 1.599\,41\sin t - 0.000\,04\sin 3t \\ x_2(t) = 1.599\,41\cos t - 0.000\,12\cos 3t \end{cases}$，采用了式(9.28)、式(9.29)中的积分格式，图 9.7 和图 9.8 显示了该数值方法计算结果与精确解比较所得的误差(其中步长 $h = 0.1$)。

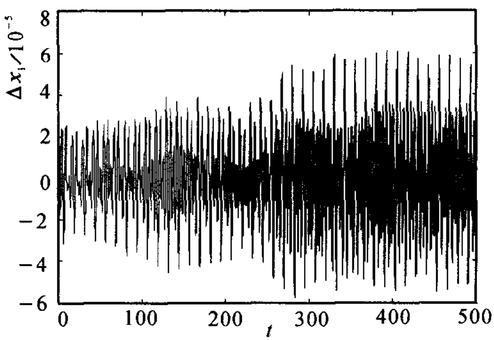


图 9.7　变量 x_1 的误差

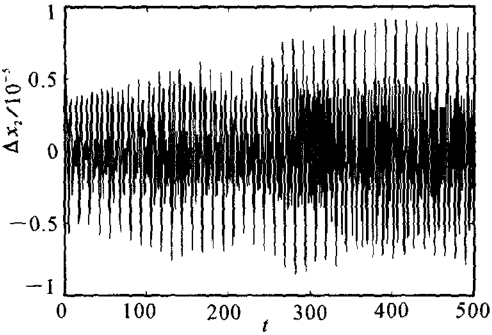


图 9.8　变量 x_2 的误差

【例 9.4】　考虑如下非线性动力学方程：

$$\begin{cases} \dot{x}_1 = x_2 \\ \dot{x}_2 = 2x_2 + t^2 - 3 \\ x_1(0) = 0,\ x_2(0) = 0 \end{cases}$$

其解析解为

$$\begin{cases} x_1(t) = -\dfrac{5}{8}\exp(2t) + \dfrac{5}{4}t - \dfrac{1}{4}t^2 - \dfrac{1}{6}t^3 + \dfrac{5}{8} \\ x_2(t) = -\dfrac{5}{4}\exp(2t) - \dfrac{1}{2}t - \dfrac{1}{2}t^2 + \dfrac{5}{4} \end{cases}$$

用本书所给出的计算式式(9.28)和式(9.29)，计算结果的相对误差如图 9.9 和图 9.10 所示，图 9.11 和图 9.12 给出了由四阶 Runge - Kutta 方法计算结果的相对误差(其中步长 $h = 0.1$)。

9.7　本章小结

精细积分是快速而有效的积分方法，对线性定常动力学方程能得到逼近于精确解的数值结果；但是，对于非齐次动力学方程却

涉及矩阵求逆的困难。本章将精细积分法和 Runge-Kutta 方法相结合，把一般动力学系统方程表示为非齐次线性方程形式，用精细积分方法求出其脉冲响应矩阵 $\boldsymbol{T}=\exp(\boldsymbol{A}\tau)$ 及另一个所需指数矩阵 $\boldsymbol{T}_1=\exp\left(\frac{1}{2}\boldsymbol{A}\tau\right)$，用 Runge-Kutta 方法求其非齐次、非线性部分的积分，给出一个求解非线性动力学方程的新的四阶数值方法。其中指数矩阵求出以后即为常量，调节 Runge-Kutta 方法的步长可提高算法的精度。另一方面，本章又把一般非线性动力学方程通过增维的方法形式地化为齐次微分方程，对所得形式上的齐次线性方程逐步施行精细积分法是十分方便的。特别地，本章还讨论了非线性动力学方程在 Minkowski 空间上的精细积分方法，对于自治系统它是保群的。书中的处理方法避免了现有精细积分法中矩阵求逆的数值不稳定性，或者逆矩阵不存在等问题，而且改善了数值求解刚性方程的稳定性条件。数值算例表明，照此把精细积分法推广到一般非线性动力学方程的积分是有效的。

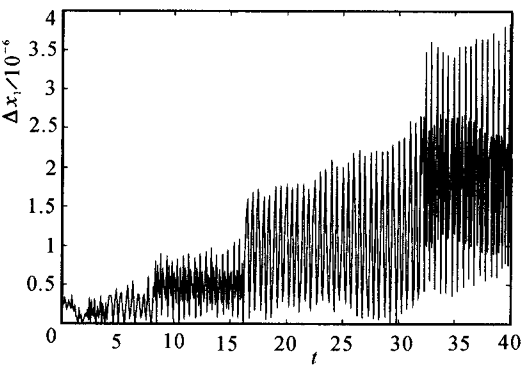


图 9.9　变量 x_1 的相对误差

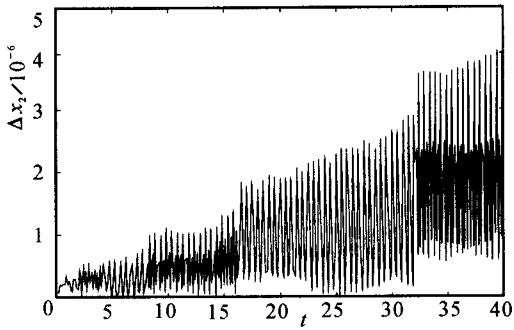


图 9.10　变量 x_2 的相对误差

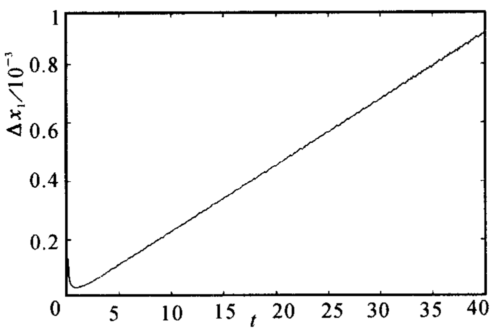


图 9.11　R-K 方法所得变量 x_1 的相对误差

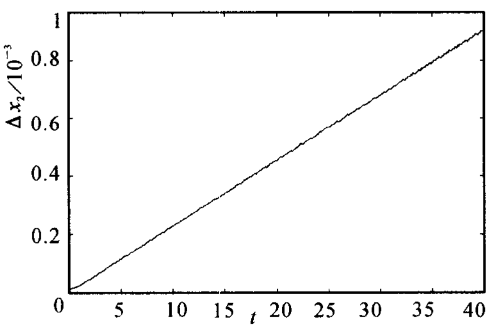


图 9.12　R-K 方法所得变量 x_2 的误差

参考文献

1 钟万勰. 结构动力学方程的精细时程积分法. 大连理工大学学报,1994,34(2): 131 ~ 136

2 钟万勰,欧阳华江,邓子辰. 计算力学与最优控制. 大连:大连理工大学出版社,1993

3 钟万勰,朱建平. 黎卡提微分方程的精细积分. 数值计算与计算机应用,1996,(1): 26 ~ 35

4 Deng Z C. The optimal solution of the constrained non-linear control system. Computers & Structures, 1994, 53(5): 1 115 ~ 1 121

5 Deng Z C, Zhao Y L. Precise integration method for nonlinear dynamic equation. International Journal of Nonlinear Sciences and Numerical Simulation, 2001, 2: 371 ~ 374

6 顾元宪,陈飚松,张洪武. 结构动力学方程的增维精细时程积分法. 力学学报,2000, 32(4): 447 ~ 456

7 王跃先,周钢,陈军,阮雪榆. 齐次扩容精细算法. 计算力学学报,2001,18(3): 339 ~ 344

8 Zhang Suying and Deng Zichen. An improved precise integration method for nonlinear dynamic system. Mechanics Research Communication, 2003, 30(1): 33 ~ 38

9 张素英,邓子辰. 非线性动力方程的增维精细积分法. 计算力学学报,2003, 20(4): 423 ~ 426